**ВЫГРУЗКА ПЛАНА НИР (ГОСУДАРСТВЕННОГО ЗАДАНИЯ) НИОХ СО РАН НА 2017 и плановый период 2018-2019 гг.**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) "Тема V.44.1.9. Механизмы химических реакций, строение и свойства органических соединений, интермедиатов, полимеров и биополимеров." (0302-2016-0007) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 44 "Фундаментальные основы химии" |

 |

|  |
| --- |
| 2017 г Совершенствование каталитических систем получения реакторных порошков СВМПЭ на основе «самоиммобилизующихся» постметаллоценовых комплексов и получение полимеров и сополимеров с их использованием. Исследование механизмов взаимодействия белковых молекул с РНК и биологическими мембранами. Выявление механизма действия некоторых биологически активных соединений. Ненасыщенные карбокатионы в конденсированной фазе. Изучение фотокаталитических превращений органических соединений действием видимого света. Электронное строение и физико-химические свойства парамагнитных гетероциклических систем и их функциональных производных – активных интермедиатов химических и биохимических процессов. Бимолекулярные нуклеофильные реакции в растворе: изменения активационных параметров и механизмы. Фторзамещенные карбокатионы – механизм передачи спин-спинового взаимодействии. 2018 г Синтез гомо- и блок-сополимеров для получения наноструктурированных пленок методом радикальной контролируемой полимеризации в присутствии нитроксильных радикалов. Исследование электростатических взаимодействий биомакромолекул, поверхностей мембран и транспорта через мембраны Исследование структуры комплексов ДНК с протеинами важных в процессах репарации ДНК. Бимолекулярные нуклеофильные реакции в растворе: изменения активационных параметров и механизмы. Превращения ряда мономеров – метилен-, этилиден- и винил-норборненов – под действием бренстедовских кислот разной силы методами ЯМР. Фотокаталитическая активация и функционализация С-F связи в полифторароматических и гетероциклических соединениях с использованием фотоактивных комплексов иридия и рутения, органических красителей (эозин Y, бенгальский розовый), фотоактивных неорганических соединений (TiO2, CdS, ZnS). Репортерные группы для диагностических ДНК-сенсоров с электрохимической детекцией гибридизации. Особенности реакционной способности азидов азоароматичекских соединений. 2019 г Синтез и исследование свойств биодеградируемых полимеров с заданными свойствами на основе полиэфиров. Применение методов ЭПР спиновых зондов и ЭПР томографии для исследования биологических систем in vivo и in vitro. Спин-меченные алкоксиамины для терраностики. Бимолекулярные нуклеофильные реакции в растворе: изменения активационных параметров и механизмы. Дизайн фотокаталитических систем на основе фотоактивных комплексов иридия и рутения для активации С-Н связей в алканах и аренах. Изучение фотокатализируемых реакций гомо- и кросс-сочетания функционализированных ароматических и гетероциклических соединений с различными партнерами |

 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 2017г. | 2018г. | 2019г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 28 | 28 | 28 |

 |

|  |
| --- |
| 2017 г Разработка методов получения новых салицилальдарилиминных лигандов и комплек¬сов дихлорида титана(IV) на их основе. Будут получены данные о корреляции активности комплексов с параметрами, характеризующими структуру комплексов, ионных интермедиатов и элементарные стадии процесса полимеризации. Будут изучены подходы к синтезу полимеров СВМПЭ и их сополимеров со стиролом. Будет исследована структура ряда комплексов протеинов и нуклеиновых кислот (РНК IRES вируса гепатита С рибосомной 40S субчастицей, структуры биологического комплекса искусственной рибонуклеазы и модельной РНК и др.) Будут разработаны новые методов получения непредельных карбокатионов, исследована их природа и взаимодействия с нейтральными молекулами с образованием новых типов карбокатионов и далее из них - химических соединений. Будут разработаны подходы к превращению связей C-F в полифторароматических соединениях во фрагменты С-алкил, С-арил и С-гетероатомный заместитель с использованием фотокаталитической активации. Будут получены знания о механизме реакций путем оценки влияния заместителей на региоселективность, кинетических измерений и определения изотопных эффектов. Будут синтезированы соединения, интересные для органической электроники и медицинской химии с использованием разработанных подходов. Будут получены данные об электронном и пространственном строении, а также структуре потенциальных поверхностей для ряда (ион)радикалов пяти- и шестичленных азотистых гетероциклов и их производных. Будут выявлены объекты, имеющие сложные многоямные поверхности потенциальной энергии Будут получены закономерности изменения активационных параметров в бимолекулярных нуклеофильных реакциях и анализ типов механизмов этих реакций в растворе. Будет предложен новый метод определения изокинетической температуры для реакций ароматического нуклеофильного замещения в растворе. Будут сделаны выводы о применимости квантово-химических методов расчета спектральных параметров и их применимости для исследования структуры фторзамещенных карбокатионов. 2018 г Будут получены блок-сополимеры с заданными свойствами: блоками различной природы и различным соотношением длины и морфологии. Будет осуществлена разработка синтеза блок-сополимеров с различной природой блоков методом графт-полимеризации. Будут получены пространственно-затруднённые нитроксильные радикалы пирролинового и пирролидинового рядов, отличающиеся высокой (самой высокой на сегодняшний день) устойчивостью в биологических образцах будут применены для исследования изучения внутри клеточных процессов с применением методов ЭПР, ПЭЛДОР, DQC, ДПЯ. Будет получена информация о структуре комплексов в процессах репарации ДНК и изменение геометрии таких комплексов при модификации биополимеров. Будет расширен метод определения изокинетической температуры для типичных бимолекулярных нуклеофильных реакций в растворе. Будет установлено строение и свойства образующихся промежуточных частиц, скелеты которых могут формировать звенья полимерных цепей, строения этих звеньев непосредственно в полимерах, полученных в условиях кислотного катализа. Будет проведено установление механизма и кинетики полимеризации. Будут установлены механизмы фотокаталитической активации аренов и гетероциклических соединений, содержащих акцепторные заместители (группы CN, NO2, CF3, атомы галогена), и данные по их реакционной способности в реакциях арилирования, алкилирования, винилирования. Методом циклической вольтамперометрии в сочетании с ЭПР –спектроскопией будут исследованы электрохимические свойства ряда органических фтор- и серусодержащих соединений, определены потенциалы их электрохимического восстановления, исследована способность к обратимому переносу электрона в бинарных смесях: апротонный растворитель - вода и в водных буферных средах. Будет разработана и осуществлена синтетическая модификация базовых органических соединений с целью последующего введения в сиквенс-специфичные олигонуклеотидные зонды для придания им электрохимической активности. Будут получены термодинамические и кинетические параметры азидо-тетразольной таутомерии. 2019 г Будут получены биодеградируемые полимеры для остесинтеза и исследованы их свойства (биодеградируемость, токсичность, биосовместимость). Будет разработана методика измерения скорости генерирования свободных радикалов (ROS), измерения сопутствующих окислительному стрессу параметров (рН межклеточной среды, оксиметрия), исследования фармакокинетики с помощью ЭПР-томографии при различных воздействиях. Будет исследована возможность применения переключаемых алкоксиаминов спин-меченных тритильными радикалами для терраностики. Будет получена обобщенная зависимость изменений внутренней энтальпии от констант селективности в уравнении Гаммета для типичных бимолекулярных нуклеофильных реакций по их константам скорости при одной температуре в растворе. Будут установлены закономерности изменения активационных параметров в бимолекулярных нуклеофильных реакциях и анализ типов механизмов этих реакций в растворе. Будут получены данные о возможности фотокаталитической трансформации ароматических аминов в бензидины и азосоединения. Будет проведен синтез координационных соединений, содержащих фотоактивные фрагменты на основе полипиридильных комплексов иридия и рутения, сопряженных с фрагментом, активным в реакциях термической С-Н-активации алканов, на основе пинцетных комплексов низковалентных родия, иридия и рутения и получение данных о фотокаталитической активности. |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Багрянская Е Г |
| Ключевые слова: строение и свойства ионов и радикалов зависимости структура-свойство механизмы реакций, строение и свойства интермедиатов методы синтеза новых веществ и материалов |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Природа химической связи, реакционная способность и механизмы реакции основных классов химических соединений Проведение комплексных теоретических и экспериментальных исследований химического строения и реакционной способности веществ, которые позволят получить фундаментальные научные знания о химических превращениях и физико-химических свойствах веществ, создать новые химические процессы, и перспективные материалы, включая наноматериалы, для нужд энергетики, электроники, медицины, оборонной техники, рационального природопользования, транспорта, авиации, информационных, коммуникационных и космических систем Разработка новых селективных методов синтеза химических соединений, веществ и материалов с практически полезными свойствами, установление фундаментальных закономерностей «структура-свойство», разработка новых физико-химических методов анализа Экспериментальные и теоретические исследования строения, реакционной способности и практически важных свойств металло-, бор-, фтор- и фосфорорганических соединений в целях получения фундаментальных научных знаний о природе химической связи и химических превращениях, которые будут использованы для разработки новых химических процессов и перспективных материалов Методология синтеза новых органических, элементоорганических, неорганических и полимерных веществ, создание новых высокоэффективных каталитических систем Проведение комплексных теоретических и экспериментальных исследований механизмов важнейших химических реакций и процессов, в том числе биохимических, а также молекулярных механизмов действия биологически активных соединений на биологические структуры, полимеризационные, каталитические и другие процессы |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Развитие существующей теории Новые экспериментальные данные о природе и человеке. Новый материал |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаб. изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций |
| Центр спектральных исследований |
| Группа изучения механизмов органических реакций |
| Лаб. промежуточных продуктов |
| Лаборатория магнитной радиоспектроскопии |
| Лаборатория электрохимически активных соединений и материалов |
| Группа синтеза катализаторов полимеризации |

 | ГРНТИ:* 31.15.15 "Исследования строения и свойств молекул и химической связи"
* 31.21.17 "Реакционная способность"
* 31.21.18 "Механизмы органических реакций"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика."

Критическая технология РФ:* 3 "Биокаталитические, биосинтетические и биосенсорные технологии."
* 4 "Биомедицинские и ветеринарные технологии."
* 17 "Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов."

Технологическая платформа:* "Медицина будущего"
* "Новые полимерные композиционные материалы и технологии"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "6. Мультиплексные платформы для молекулярной диагностики онкологических, сердечно-сосудистых, аутоиммунных и инфекционных заболеваний"

Ключевые слова к теме (проекту):* строение и свойства ионов и радикалов
* методы ЯМР и ЭПР спектроскопии
* квантово-химические методы
* механизмы реакций
 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) "Тема V.45.3.4. Фундаментальные основы создания органических и гибридных наноструктурированных материалов для фотоники, сенсорики, электроники." (0302-2016-0006) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 45 "Научные основы создания новых материалов с заданными свойствами и функциями, в том числе высокочистых и наноматериалов" |

 |

|  |
| --- |
| Синтез мономерных и полимерных соединений для сенсорных, оптических и электронных приложений. Квантово-химическое моделирование и исследование их физико-химических свойств, сенсорной способности, оптических и электронных свойств. 2017 г. 1. Синтез и функциональная модификация базовых соединений с функцией обратимого переноса электрона при низких потенциалах. Синтез и исследование электрохимических свойств прекурсоров (промежуточных соединений для получения мономеров) и мономеров. 2. Разработка методов синтеза сопряженных нелинейно-оптических аза- и полиметиновых хромофоров, обладающих большим дипольным моментом и поляризуемостью для электро-оптических пленочных материалов. Исследование их физико-химических свойств. 3. Синтез серусодержащих фторированных органических соединений как основы для пространственно-разделяющих дендримерных спейсерных блоков высокополяризуемых хромофоров. 4. Разработка методов синтеза предшественников люминофоров как люминесцентных сенсоров на амины. Исследование их сенсорной способности. 5. Исследования в области электрохимической и химической модификации поверхности анодированного алюминия. 6. Разработка методов синтеза компонентов фотополимерных композиционных органических и гибридных материалов для литографии и голографии. Создание и исследование физико-химических свойств фотополимерных голографических и литографических материалов на основе синтезированных соединений. 2018 г. - Создание новых функциональных полимерных наноматериалов, способных образовывать бистабильные состояния в электрических микро- и наноконтактах при электрических переключениях с малым вольтажом. Разработка методов синтеза сопряженных аза и полиметиновых хромофоров с большим дипольным моментом и поляризуемостью. Исследование физико-химических свойств синтезированных соединений и их квантово-химическое моделирование. Разработка методов синтеза прекурсоров линкерных молекул и дендримеров первой генерации на их основе. Разработка методов синтеза предшественников люминофоров как люминесцентных сенсоров на амины. Исследования сенсорной способности синтезированных соединений. Исследования оптических, люминесцентных и др. физико-химических характеристик нанопористой поверхности анодированного алюминия, модифицированной электрохимичеcки, химически, органическими соединениями. Разработка методов синтеза компонентов фотополимерных композиционных органических и гибридных материалов для литографии и голографии. Создание на основе синтезированных соединений образцов фотополимерных и фоторезистивных материалов. Исследование их физико-химических характеристик. 2019 г. Получение модельных наноконтактов – элементарных ячеек памяти, измерение их вольтамперных характеристик, поведения в циклах «запись- стирание», установление зависимостей: структура полимера – свойство наноконтакта. Тестирование возможности ЭПР-томографии X- диапазона для картирования состояния ячеек памяти модельного запоминающего устройства. Разработка методов синтеза линкерных дендрообразных молекул различного поколения и их встраивания в синтезированные хромофоры. Разработка методов получения модельных нелинейно-оптические материалов на основе синтезированных сопряженных аза и полиметиновых хромофоров. Разработка методов синтеза сенсорных молекул с улучшенными свойствами. Разработка методов получения модельного сенсорного материала на основе синтезированных соединений и прототипа устройства считывания. Исследования возможности оптических и сенсорных приложений модифицированной нанопористой поверхности анодированного алюминия. Разработка методов синтеза компонентов фотополимерных композиционных органических и гибридных материалов для литографии и голографии. Создание на основе синтезированных соединений образцов фотополимерных и фоторезистивных материалов. Исследование их физико-химических характеристик и свойств при оптической записи голографических и литографических микроструктур. |

 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 2017г. | 2018г. | 2019г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 6 | 8 | 8 |

 |

|  |
| --- |
| 2017 г. 1.1. Будет осуществлен синтез исходных соединений, прекурсоров и мономеров содержащих в своей структуре электрохимически активные тиоксантеноновые пендантные группы, способные к обратимому одноэлектронному переносу при низких потенциалах. 1.2. Выявлены закономерности электрохимического восстановление (ЭХВ) синтезированных динитро-, диамино- и N,N’-пиперазин- производных тиоксантен-9-онов, полученные методами методами ЦВА и ЭПР в сочетании со стационарным ЭХВ при контролируемом потенциале с целью оценки устойчивости одноэлектронно-восстановленных форм (анион-радикалов) и изучения их электронного строения. 2.1 Будет проведен синтез сопряженных аза/ полиметиновых хромофоров с большим дипольным моментом и поляризуемостью, содержащих трицианодифенильный акцепторный блок. 2.2 Методами ДСК и/или ДМА определена их термостабильность, получены композиционные пленки хромофор-полимер, проведен полинг пленок в электрическом поле и получены данные об их нелинейно-оптических свойствах второго порядка. 2.3 Будет проведен синтез донорных блоков нелинейно-оптических хромофоров на основе полифторированных триарилпиразолинов и методом формилирования получены альдегидные производные для формирования системы полиметинового сопряжения. 3.1 Будет проведена разработка методов химической трансформации ядра спейсерного блока на основе замещенных бензойных кислот и созданы комбинации концевых функциональных групп для введения ароматических фторированных серусодержащих фрагментов. Метод синтеза, идентификация, физико-химические характеристики целевых соединений. 4.1. Синтез пирилоцианиновых красителей с юлолидиновыми заместителями как предшественников пиридоцианиновых люминофоров и проведение их реакции с аминами в адсорбированном состоянии на силикагеле и оксидах алюминия. 4.2. Данные о реакционной способности пирило- и пиридоцианиновых люминофоров с первичными ароматическими аминами в адсорбированном состоянии. 5.1. Проведение последовательной циклической модификация нанопористой поверхности анодированного алюминия в бинарных кислотных ваннах анодирования. Проведение электрохимической и химической металлизации нанопористого анодированного алюминия. 5.2. Выявление особенностей интерференционной структуры спектров отражения полученных образцов. Влияние нанесения аналитов на спектральные сдвиги интерференционных пиков в спектрах отражения металлизированных пленок анодированного алюминия. 6.1. Будут разработаны методы синтеза акрильных производных фторированных халконов и триарилпиразолинов. Данные о фоточувствительных и физико-химических свойствах акрильных производных фторированных халконов. 6.2. Будут получены данные о процессах рельефообразования и создания микроструктур в гибридном акрилат-тиол-силоксановом фотополимерном материале, что позволит выявлить закономерности записи микроструктур на гибридном материале с бинарным и многоуровневым профилем поверхности. 6.3. Синтез акрилоильных производных алифатических производных дитиоазаспиропиперидинов. Исследование их показателя преломления и данные о фотополимеризации в пленках. Образцы синтезированных соединений в фотополимеризованных пленках с увеличеним показателя преломления пленок свыше 1,6. 2018 г. На основе полученных мономеров будут синтезированы соответствующие полимеры, исследованы их ключевые свойства, предъявляемые к органическим материалам для применения в электронике и устройствах памяти: молекулярно-массовое распределение, температура стеклования, устойчивость к термическому и термоокислительному разложению, коэффициенты термического расширения. Методом циклической вольтамперометрии будут изучены электрохимические свойства полимеров в адсорбированном слое: редокс-потенциалы и обратимость электронного переноса, а также электрохромные свойства. Будет проведен синтез сопряженных аза и полиметиновых хромофоров с большим дипольным моментом и поляризуемостью. Получены данные об их физико-химических свойствах синтезированных соединений и результаты их квантово-химического моделирования. Будет проведен синтез прекурсоров линкерных молекул и дендримеров первой генерации на их основе. Будет проведен синтез с предшественников люминофоров как люминесцентных сенсоров на амины. Будут получены данные о сенсорной способности синтезированных соединений. Будут получены данные об оптических, люминесцентных и др. физико-химических характеристик нанопористой поверхности анодированного алюминия, модифицированной электрохимичеки, химически, органическими соединениями. Будет проведен синтез синтеза компонентов фотополимерных композиционных органических и гибридных материалов для литографии и голографии. Будут получены модельные образцы фотополимерных и фоторезистивных материалов на основе синтезированных соединений. Будут получены данные об их физико-химических характеристиках. 2019 г. На основе новых электроноактивных полимерных материалов будут получены пробные тонкопленочные запоминающие устройства типа электрод/полимер/электрод с использованием технологий вакуумного напыления, исследованы их вольтамперные характеристики, определены основные параметры памяти: вольтаж и устойчивость ON/OFF переключений, соотношения токов переключений, энергонезависимость, поведение в циклах запись-чтение-стирание. Будет установлена зависимость между полученными характеристиками устройств памяти и структурой электрохимически активных групп. Будет впервые протестирована возможность применения ЭПР-томографии X- диапазона для построения визуального изображения состояния ячеек памяти модельного запоминающего устройства. Будет проведен синтез линкерных дендрообразных молекул различного поколения и проведено их встраивание в синтезированные хромофоры. Будут получены модельные нелинейно-оптические материалы на основе синтезированных сопряженных аза и полиметиновых хромофоров с линкерными дендримерными блоками. Будет проведен синтез сенсорных молекул следующего поколения с улучшенными свойствами. Будет получен модельный сенсорный материал на основе синтезированных соединений и экспериментальный прототип устройства считывания. Будут получены данные об использовании свойств модифицированной нанопористой поверхности анодированного алюминия в оптических и сенсорных приложениях. Будет проведен синтез компонентов фотополимерных композиционных органических и гибридных материалов для литографии и голографии. Будут получены образцы фотополимерных и фоторезистивных материалов на основе синтезированных соединений. Будут получены данные их физико-химических характеристик и свойств при оптической записи голографических и литографических микроструктур. |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Шелковников  В |
| Ключевые слова: оптические, электрохимические сенсоры нелинейно-оптические материалы фотополимеры |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Получение принципиально новых фундаментальных знаний о строении металлических, керамических, природных и синтетических полимерных наноструктур и композитов Создание нового поколения высокотемпературных экологически безопасных химически- и коррозионностойких высокотехнологичных полимерных и композиционных материалов на основе природных и синтетических волокон, включая наноструктурированные, обладающие высокими механическими и специальными функциональными свойствами (электропроводящими, пьезоэлектрическими, фотохромными, сорбционными, мембранноразделительными) на основе гибко- и жесткоцепных полимеров различной природы Разработка полимерных систем, обладающих нелинейными оптическими свойствами, проводимостью в тонких слоях на границе полимер-металл, фотоактивными свойствами Разработка уникальных высокочувствительных сенсоров нанометровых размеров (пленки) Разработка перспективных полифункциональных материалов, обладающих синергизмом оптических, магнитных и электрических свойств, и функциональных устройств на их основе |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Развитие существующей теории Лабораторный образец Новый материал |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаборатория органических светочувствительных материалов |
| Группа органических материалов для электроники |
| Лаборатория электрохимически активных соединений и материалов |
| Лаборатория изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций |
| Лаборатория галоидных соединений |
| Центр спектральных исследований |

 | ГРНТИ:* 31.15.15 "Исследования строения и свойств молекул и химической связи"
* 31.15.29 "Фотохимия. Лазерохимия"
* 31.15.33 "Электрохимия"
* 31.21.19 "Общие синтетические методы"
* 31.25.15 "Структура и свойства природных и синтетических высокомолекулярных соединений"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Индустрия наносистем."

Критическая технология РФ:* 17 "Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов."

Технологическая платформа:* "Инновационные лазерные, оптические и оптоэлектронные технологии – фотоника"
* "Новые полимерные композиционные материалы и технологии"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "1. Исследование, разработка и создание новых поколений систем, приборов, устройств и их компонентов на базе технологий нано- и микросистемной техники"
* "13. Электрохимические накопители и преобразователи энергии для энергоэффективного и экологичного транспорта, робототехники, распределённой и возобновляемой энергетики"

Ключевые слова к теме (проекту):* органическая электроника
* полевые транзисторы
* оптические, электрохимические сенсоры
* нелинейно-оптические материалы
* фотополимеры
 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) "Тема 46.1.3. Высокотехнологическая аналитическая платформа для исследований в области фармакогнозии, фитохимии, клинической и экспериментальной медицины, химической экологии и для обеспечения экологической, фармацевтической и продовольственной безопасности." (0302-2016-0005) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 44 "Фундаментальные основы химии" |

 |

|  |
| --- |
| 2017-2020 гг Блок 1. Развитие методологии детального индивидуально-группового анализа, идентификации и определения подлинности органических соединений и объектов антропогенного, синтетического и природного происхождения на основе хроматографического профилирования. Блок 2. Разработка методологии фитохимического анализа важнейших лекарственных и других полезных растений флоры Сибири. Блок 3. Хроматографическое профилирование тритерпеноидов и полиизопреновых спиртов как основа разработки хемотаксономических критериев систематики растений сибирской флоры. Блок 4. Разработка и оптимизация комплексных методик анализ природных и синтетических веществ и материалов, а также объектов окружающей среды и живых систем методами масс-спектрометрии и хроматомасс-спектрометрии. Блок 5. Разработка методов анализа синтетических и природных полимерных материалов методами оптической спектроскопии с применением термических, механических и диэлектрических измерений. Блок 6. Развитие методов элементного анализа, термического анализа и парофазной осмометрии как основы аналитического сопровождения исследований синтетических и природных органических веществ и создания новых материалов. Блок 7. Развитие методологии качественного и количественного анализа композиционных полимерных материалов различного назначения. Блок 8. Развитие методов и подходов анализа молекулярной структуры и супрамолекулярной архитектуры кристаллов органических соединений – перспективных материалов, биологически активных и диагностических веществ на основании метода рентгеноструктурного анализа. |

 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 2017г. | 2018г. | 2019г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 21 | 21 | 21 |

 |

|  |
| --- |
| 2017-2019 По результатам проекта Будут получены и исследованы хроматографические профили стойких органических загрязнителей в объектах окружающей среды Байкальской природной территории (оз. Байкал, дельта и бассейн р. Селенги, оз. Хубсугул) и будут установлены закономерности их поступления, распределения и аккумуляции; на основе анализа детальных спектрально-хроматографических профилей будут разработаны подходы к исследованию индивидуально-группового состава биологически активных природных и синтетических композиций для выявления маркерных соединений и изучения процессов, протекающих в живых системах; разработанные подходы будут апробированы на примере ряда биологически активных композиций растительного и животного происхождения; будут изучены методом гель-проникающей хроматографии водорастворимые полимеры синтетического и природного происхождения, перспективные для создания новых материалов; будут определены условия регистрации псевдомолекулярных ионов аммониевых солей методом ESI-MS. Будут изучены хроматографические профили тритерпеноидов и полиизопреновых спиртов некоторых растений семейств Salicaceae и Orobancháceae, полученных методами ВЭЖХ и ГХ-МС, разработка хемотаксономических критериев систематики растений сибирской флоры (как дикорастущих, так и интродуцированных) на основе данных хроматографического профилирования. Будут разработаны методики прецизионного качественного и количественное анализа составов сложных смесей методами ГХ-МС, ВЭЖХ-МС и пиролитических методов: (1) экстрактов различных частей растений, произрастающих на территории Южной Сибири и содержащих биологически активные вещества, перспективные для разработки медицинских препаратов; (2) искусственных смесей различного происхождения и назначения, содержащие низкомолекулярные растительные метаболиты и продукты их трансформаций; (3) искусственных смесей, содержащие перспективные и уже востребованные органические соединения – ароматические, гетероциклические и полифторированные производные. Будут исследованы новые подходы для определения подлинности растительного сырья и фитопрепаратов на основе комплексной химической идентификации маркерных соединений и оценки хроматографических профилей с использованием современных методов спектрально-хроматографического анализа: (1) прецизионный хроматографический, хромато-спектроскопический и спектроскопический анализ маркеров и метаболических профилей для хвойных растений Южной Сибири; (2) будет проведено изучение химической вариабельности выбранных видов растений в границах естественных ареалов для определения допустимых диапазонов контролируемых показателей при определении подлинности и качества фитопрепаратов. Будут усовершенствованы методы и методология определения структуры органических веществ и материалов с использованием методов оптической спектроскопии: (1) изучение свойств органического комплекса, определяющего структуру и свойства соломы злаковых растений и ответственного за формирование механизмов защиты злаков от патогенных микроорганизмов; (2) изучение пигментов и красителей из археологического текстиля; (3) изучение спектральных свойств низкомолекулярных растительных метаболитов и продуктов их химической модификации; (4) исследование перспективных и уже востребованных органических соединений различной химической природы (алифатические, ароматические, гетероциклические, элементоорганические и полифторированные производные) и различного назначения (мономеры для построения перспективных полимерных материалов, фотоактивные соединения, лиганды и комплексы на их основе, термолабильные соединения, биологически активные вещества, органические магнетики, жидкие кристаллы, спиновые метки и спиновые зонды). Будут усовершенствованы микроаналитические приемы и процедуры для изучения состава синтетических органических и элементоорганических соединений и природных веществ: (1) изучены содержания металлов и металлоидов в составе синтетических органических и природных объектов с использованием атомно-эмиссионной спектрометрии с микроволновой плазмой; (2) разработаны методики пробоподготовки для выполнения микроанализов с использованием микроволновой системы Milestone; (3) разработаны методики определения селена и бора в составе лекарственных препаратов и растительного сырья; (4) изучены процесса связывания металлов гуминовыми кислотами; (5) исследованы особенности пробоподготовки и анализа основных органогенных элементов и металлов в составе фторорганических соединений (в том числе фторграфитов); (5) исследованы зависимости элементного состава и термических свойств гуминовых кислот торфа от глубины залегания исходного сырья и климатической зоны формирования торфа; (6) разработаны методики анализа ИК-спектров гуминовых кислот с использование компьютерной системы ИК ЭКСПЕРТ; создана электронная коллекция ИК-спектров гуминовых кислот. Будут установлены и изучены молекулярная и кристаллическая структура новых функциональных соединений методом рентгеноструктурного анализа (РСА): (1) новых полигалогензамещенных 2,1,3-бензотиа(селена)диазолов, 1,3-бензодиазолов и 1,2,3-триазолов, производные которых характеризуются комплексом уникальных биологических, физико-, термохимических и других свойств; (2) комплексов с новым типом структурной организации на основе Cu(hfac)2, Zn(hfac)2 и Tb(hfac)2 c алкоксиаминами, изучение связи структура-свойство в них; (3) изучена ориентации молекул и супрамолекулярных образований в реальном кристалле для соединений тиофен-фениленового и фуран-фениленового ряда, проявляющих полупроводниковые и люминесцентные свойства с целью изучения взаимосвязи структура-свойство; (4) новых природных соединений и их производных – перспективных биологически активных агентов, анализ их молекулярной структуры и межмолекулярных взаимодействий, предшествующий моделированию молекулярного докинга с биологическими объектами; (5) новых типов нитроксильных радикалов и их комплексов с металлами, обладающих магнитными свойствами, анализ структурных особенностей в плане установления связи структура-свойство; (6) новых комплексных соединений серебра(I), представляющих интерес в качестве катализаторов различных реакций, фармакологических препаратов, хемосенсоров, прекурсоров наноразмерного серебра, а также материалов для оптических устройств; (7) новых комплексов меди(I) на основе производных трис(2-пиридил)фосфина, содержащих в своей структуре практически беспрецедентный структурный мотив Cu4I6, имеющий различную пространственную структуру в зависимости от природы лигандного окружения. Будет развита методология физико-химического анализа сложных композиционных систем различного назначения в целях создания импортозамещающих новых средств (продуктов) не только с эффективными функциональными свойствами, но и с высокой экологической безопасностью: исследованы перспективные многокомпонентные средства на водной и водно-органической основе, применяемые в производстве полимерной продукции и в современных технологиях предстерилизационной очистки изделий медицинского назначения; будет проведена идентификация в исследуемых композиционных системах базовых функциональных ингредиентов и добавок, а также компонент, негативно влияющих на качество продукции и ее экологическую безопасность, с целью создания новых высокотехнологичных и безопасных средств и продуктов. Будут получены новые знания в области методологических подходов к анализу многокомпонентных систем, а полученные результаты могут быть использованы для создания чистящих средств для оборудования по переработке полимеров; моющих и дезинфицирующих средств в современных технологиях предстерилизационной автоматической очистки изделий медицинского назначения, полимерных композиций для временных съемных покрытий, применяемых в различных отраслях: строительстве, автомобильной промышленности, при дезактивации различных объектов |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Ткачев А В |
| Ключевые слова: хроматографические методы анализа природные вещества определение стойких органических загрязнителей супрамолекулярная архитектура аналитическое сопровождение рентгеноструктурный анализ |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Проведение комплексных теоретических и экспериментальных исследований химического строения и реакционной способности веществ, которые позволят получить фундаментальные научные знания о химических превращениях и физико-химических свойствах веществ, создать новые химические процессы, и перспективные материалы, включая наноматериалы, для нужд энергетики, электроники, медицины, оборонной техники, рационального природопользования, транспорта, авиации, информационных, коммуникационных и космических систем Новые методы физико-химических исследований и анализа веществ и материалов Увеличение эффективности хроматографического и других методов анализа Будет сделан акцент на развитие масс-спектрометрического метода анализа в его современных вариантах, в том числе с использованием десорбции и ионизации при обычных (комнатных) условиях Будут разработаны методики изучения энантиомерного состава основных летучих компонентов экстрактов растительного и животного происхождения |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Развитие существующей теории Методы исследований, обработки и анализа База данных Методика |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаборатория экологических исследований и хроматографического анализа НИОХ СО РАН |
| Лаборатория терпеновых соединений НИОХ СО РАН |
| Группа функциональных материалов НИОХ СО РАН |
| Лаборатория микроанализа НИОХ СО РАН |
| Группа определения состава и строения органических веществ НИОХ СО РАН |
| Центр спектральных исследований |

 | ГРНТИ:* 31.15.15 "Исследования строения и свойств молекул и химической связи"
* 31.15.17 "Кристаллохимия и кристаллография"
* 31.19.29 "Анализ органических веществ"
* 31.21.01 "Общие вопросы"
* 31.23.17 "Терпены и родственные соединения"
* 31.23.33 "Липиды"
* 31.23.39 "Кумарины, флавоноиды, антоцианины и родственные соединения"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Науки о жизни."

Критическая технология РФ:* 19 "Технологии мониторинга и прогнозирования состояния окружающей среды, предотвращения и ликвидации её загрязнения."

Технологическая платформа:* "Технологии экологического развития"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "9. Разработка технологий интегральной оценки экологической безопасности регионов и городов России"

Ключевые слова к теме (проекту):* стойкие органические загрязнители
* полициклические ароматические углеводороды
* полихлорированные бифенилы
* хлорорганические пестициды
* энергоемкие вещества
* жирные кислоты
* сесквитерпеноиды
* тритерпеноиды
* углеводы
* лигнаны
* лигнин
* пигменты растений
* антоцианы
* флавоны
* фенилпропаноиды
* флавоноиды
* гуминовые кислоты
* селен, теллур
* молекулярная структура
* супрамолекулярная архитектура
* хроматографический профиль
* хироспецифический анализ
* масс-спектрометрия
* хромато-масс-спектрометрия
* рентгеноструктурный анализ
* атомно-эмиссионная спектроскопия
* ультразвуковая активация
* аналитическое сопровождение
* электронные коллекции
* базы данных
 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) "Тема 48.1.5. Разработка научных основ селективного синтеза новых фармакофоров и предшественников лекарственных средств на основе хемоспецифичных каталитических превращений природных алкалоидов, терпеноидов и кумаринов" (0302-2016-0004) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 48 "Фундаменталь-ные физико-химичес-кие исследования механизмов физиологических процессов и создание на их основе фармакологических веществ и лекарственных форм для лечения и профилактики социально значимых заболеваний" |

 |

|  |
| --- |
| 2017 год 1. Функционализация и макроциклизация лабдановых дитерпеноидов и их производных с помощью катализируемых реакций образования С-С связи (окислительной реакции Хека) и СuAAC-реакции. Исследование процессов комплексообразова-ния новых типов макроциклов с ионами Cu2+, Mg2+, Zn2+, и анионом F-. 2.Каталитические способы модификации производных трициклических дитерпеноидов и стероидных соединений с получением гетерозамещенных производных, а также аналогов дитерпеновых алкалоидов. Изучение структурных закономерностей образования дитерпеноидных циклических амидинов. 3. Изучение тандемной реакции кросс-сочетания-циклоконденсации в ряду алкинильных производных дитерпеновых алкалоидов. Разработка каталитических условий генерирования алкинонов на основе производных тевинона и лаппаконитина. 4. Исследование реакций кросс-сочетания метиленлактонов гвайанового типа с галогензамещенными пиридинами и пиримидинами. Изучение влияния природы реагирующих компонентов на направление реакций образования С-С связи. 5. Направленные превращения растительных кумаринов. Сравнительное изучение реакции Соногаширы пеурутеницина, пеуценола и 6-циано-7-гидроксикумарина. Исследование синтетического потенциала 7-этинилкумаринов. Исследование реакции каталитического аминометилирования пеурутеницина, пеуценола и 6-циано-7-гидроксикумарина, в том числе, взаимодействие с растительными алкалоидами и их производными. 2018 год 1. Разработка каталитических методов направленной гибридизации растительных фуранолабданоидов и тритерпеноидов. Получение и характеристика новых групп полифункциаональ-ных производных. 2. Способы синтеза алкинилзамещенных производных диосгенина по циклу В. Каталитические реакции окисления изопимаровой кислоты и ее производных. Синтез полициклических производных левопимаровой кислоты 3. Каталитические методы синтеза гибридных соединений на основе алкинильных производных дитерпеновых, изохинолиновых и пуриновых алкалоидов и нуклеозидов, соединенных гетероциклическими линкерами. 4. Исследование реакций кросс-сочетания метиленлактонов гвайанового типа с производными ксантинов и пиримидинов. Новые превращения сантонина и десмот-ропосантонина. 5. Направленные превращения растительного фурокумарина пеуцеданина по кумариновому фрагменту. Изучение эффекта анхимерного содействия с целью создания новых селективных методов функционализации. Разработка подходов к синтезу гетероаннелирован-ных и макроциклических производных кумаринов с использованием последовательности реакций Уги и СuAAС, а также реакций циклоизомеризации. 2019 год 1. Cелективные превращения высших терпеноидов. Разработка “onepot” способа получения аннелированных гетероциклических соединений (формирование замещенных по альфа-положению к гетероатому 1,3-дигидроизобензо-фуранового или изоиндолинового циклов) реакцией терминальных лабданоидных алкинов с альдегидами, в присутствии солей меди. 2. Направленные каталитические превращения хинопимаровой кислоты по хиноновому фрагменту. Исследование реакции Пикте-Шпенглера новых производных 16-формил-15,16-дигидро-изопимаровой кислоты. 3. Молекулярный дизайн и синтез производных дитерпеновых алкалоидов с помощью Pd-катилизируемых реакций производных дитерпеновых и изохинолиновых алкалоидов. 4. Синтез гетероциклических производных метиленлактонов эвдесманового типа – эпоксиизоалантолактона и изоалантолактона. Получение новых 13(галогенарил)эвдесманолидов, изучение их превращений. Изучение макроциклизации ацетиленовых производных эвдесманолидов по атомам углерода С-13 и С-15. 5. Направленные превращения производных растительных фурокумаринов пеуцеданина, ореозелона и пеуценидина. Разработка способа синтеза кумарин-замещеных пиразолов на основе трехкомпонентной тандемной реакции кросс-сочетания циклизации, катализируемой соединениями палладия и меди. Изучение эффекта анхимерного содействия с целью создания новых методов функционализации кумаринов. Разработка оригинальных подходов к синтезу макроциклических производных кумаринов. |

 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 2017г. | 2018г. | 2019г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 15 | 18 | 22 |

 |

|  |
| --- |
| 2017 год 1. Рациональные схемы синтеза макрогетероциклических структур, содержащих фрагменты природных фуранолабданоидов и гетероциклов, сочлененных метиленовыми, оксаметиленовыми, или амидными звеньями. Синтез и исследование ряда оптически активных макроциклических гликофанов с фрагментом дитерпеноида фломизоиковой кислоты, а также новых типов макроциклических гликодитерпеноидов. Комплексообразующие свойства и цитотоксическая активность макрогетероциклических соединений на основе фуранолабданоидов. 2. Новые гетероциклические производные и полициклические структуры на основе малеопимаровой, хинопимаровой, изопимаровой кислот и диосгенина. Выявление афинности производных дитерпеноидов к центру связывания в молекулярных мишенях в сигнальном пути Nrf-2/Keap1, данные о противовоспалительной и противоопухолевой активности. 3. Разработка “one-pot” синтеза гибридных соединений с фрагментами пиразола и 1,3-пиримидина на основе производных природных изохинолиновых и дитерпеновых алкалоидов. Получение данных об антиаритмической активности гетероциклических производных лаппаконитина. Противоопухолевые и противомикробные агенты на основе кофеина и теофиллина. 4. Получение фундаментальных данных o каталитических реакциях образования С-С связи c участием полифункциональ-ных метиленлактонов. Новые группы функционализированных гвайанолидов и эвдесманолидов по положению С-13. Получение данных о цитотоксичности и противоопухолевой активности “гибридных” гвайанолидов. 5. Способы синтеза оригинальных групп 6,7,8-тризамещенных кумаринов. Получение данных о цитотоксической, противовоспалительной, противовирусной и антикоагулянтной активности синтезированных производных. Характеристика новой группа кумариновых антикоагулянтов. 2018 год 1. Новая стратегия синтеза гибридных дитерпеноидов и (алкин-амин-алкен)содержащих макроциклов на основе Cu-катализируемой трехкомпонентной реакции лабданоидных альдегидов, алкинов и аминов. Новые производные лупановых тритерпеноидов с гликозилтриазолильными заместителями в положению С-30. Данные о противовоспалительной и противоопухолевой активности новых производных ди- и тритерпеноидов. Новые индукторы опоптоза опухолевых клеток на основе фурановых дитерпеноидов. 2. Высокоселективные превращения трициклических дитерпенолидов и анннелированных производных. Селективный каталитический синтез терминального (алленил)амида и соответствующих индолилсодержащих дитерпеноидов на основе изопимаровой кислоты. Создание библиотек биологически активных производных диосгенина и изопимаровой кислоты. 3. Новые абсолютно селективные способы направленной модификации природных ксантинов, изохинолиновых и дитерпеновых алкалоидов. Новые противомикробные агенты на основе пуриновых алкалоидов. 4. Получение фундаментальных данных o каталитических реакциях образования С-С связи c участием полифункциональ-ных метиленлактонов. Получение данных о цитотоксичности новых “гибридных” соединений по отношению к опухолевым клеткам человека. 5. Новые способы синтеза 3-замещенных фурокумаринов, аналогов варфарина. Получение оригинальных групп гетероаннелированных полициклических структур на основе фурокумаринов. Идентификация биоактивных производных фурокумаринов, ингибирующих NF-kB биологические функции, включенных в кистозный фиброз. 2019 год 1. Высокоселективные способы синтеза гибридных органических структур с введением гидроксихамещенных изоиндольных или изобензофурановых фрагментов на основе фломизоиковой кислоты. 2. Способы синтеза аналогов комбретастатина А-4 на основе хинопимароой кислоты. Селективный синтез гибридных соединений типа дитерпеноид – бетакарболиновый алкалоид на основе изопимаровой кислоты. Данные о противовоспалительной и противоопухолевой активности новых гибридных структур. 3.Новые абсолютно селективные способы направленной модификации производных тевинонаб сантонина и дитерпеновых алкалоидов. Противоопухолевые, противовоспалительные и анальгетические агенты на основе изохинолиновых и дитерпеновых алкалоидов. 4. Селективные каталитические превращения метиленлактонов эвдеманового типа. Синтез азидов на основе 4,15-эпокси-13-метоксиизоалантолактонов. Димерные и макроциклические производные эвдесманолидов. Получение данных о цитотоксичности новых макроциклических соединений по отношению к опухолевым клеткам человека. 5. Оригинальные способы синтеза димерных кумаринов, а также макрогетероциклов, в том числе, содержащих фрагменты 1,2,3-триазолов и гликозидов в линкерной цепи. Антикоагулянтные свойства димерных фурокумаринов. Комплексообразующие свойства, противовоспалительная и цитотоксическая активность макрогетероциклических соединений на основе фурокумаринов. |
| Характеристика:Фундаментальный результат |
| Руководитель: Шульц Эльвира Эдуардовна |
| Ключевые слова: Органический синтез Высшие терпеноиды Алкалоиды Кумарины Сесквитерпеновые лактоны Противовоспалительная, анальгетическая и противоопухолевая активность зависимость строение - активность |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Создание инновационных лекарственных средств для лечения и профилактики социально значимых заболеваний, в том числе для лечения онкологических, сердечно-сосудистых, нейродегенеративных, вирусных, инфекционных и ряда других заболеваний, а также анти-наркотических и анти-ВИЧ препаратов Развитие методов компьютерного молекулярного дизайна, включая методы квантовой химии и молекулярной динамики, для предсказания структуры и свойств новых биологически активных веществ Создание обобщенных количественных представлений о взаимодействии «лекарственная молекула - биомишень», создание молекулярных моделей биомишеней для «докинга» потенциальных лекарственных веществ Развитие методов медицинской химии для обеспечения направленной модификации биологически активных веществ в целях создания перспективных лекарственных кандидатов, действующих на патогенез заболеваний Разработка теории и практики создания нового поколения мультимодальных препаратов, действующих одновременно на несколько значимых фармакологических мишеней Формирование фокусированных библиотек синтетических и природных биологически активных соединений |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Патент Новые экспериментальные данные о природе и человеке. Новые средства профилактики и лечения (препараты крови, антибиотики, вакцины, лекарственные препараты и средства, БАД, продукты питания, вакцина, диагностикум, дезинфицирующие средства), новые препараты защиты растений, животных |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаборатория медицинской химии |
| Центр спектральных исследований |
| Технологический отдел опытного химического производства |
| Лаборатория фармакологических исследований |

 | ГРНТИ:* 31.21.17 "Реакционная способность"
* 31.21.27 "Гетероциклические соединения"
* 31.23.17 "Терпены и родственные соединения"
* 31.23.21 "Алкалоиды"
* 31.23.39 "Кумарины, флавоноиды, антоцианины и родственные соединения"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Науки о жизни."

Критическая технология РФ:* 4 "Биомедицинские и ветеринарные технологии."

Технологическая платформа:* "Медицина будущего"
* "Биоиндустрия и биоресурсы - БиоТех2030"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "7. Персонализированная медицина социально значимых и орфанных заболеваний эндокринной системы"

Ключевые слова к теме (проекту):* трициклические дитерпеноиды
* сесквитерпеновые лактоны
* кумарины
* реакция Хека
* реакция Соногаширы
* циклоприсоединение
* каскадные реакции
* исследования in vitro и in vivo
* исследования противовоспалительной, анальгетической и противоопухолевой активности
* методы QSAR-анализа и молекулярного моделирования
 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) "Тема 48.1.6. Разработка методов создания соединений-лидеров в наиболее социально значимых терапевтических областях путем направленной трансформации природных и синтетических стартовых молекул. Организация биологических испытаний полученных соединений" (0302-2016-0003) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 48 "Фундаменталь-ные физико-химичес-кие исследования механизмов физиологических процессов и создание на их основе фармакологических веществ и лекарственных форм для лечения и профилактики социально значимых заболеваний" |

 |

|  |
| --- |
| 2017. Формирование фокусированных библиотек синтетических и природных биологически активных соединений; 2018. Развитие методов медицинской химии для обеспечения направленной модификации биологически активных веществ в целях создания перспективных лекарственных кандидатов, действующих на патогенез заболеваний; 2019. Обеспечение доклинических испытаний в соответствии с установленными стандартами GLP вновь синтезированных оригинальных соединений и веществ природного происхождения |

 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 2017г. | 2018г. | 2019г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 30 | 30 | 30 |

 |

|  |
| --- |
| 2017. Создание библиотек биологически активных соединений на основе природных стартовых молекул – усниновой кислоты, камфоры и борнеола, ди- и тритерпеновых кислот. 2018. Разработка синтетических методов модификации стартовых скаффолдов, позволяющих проводить разнообразную химическую трансформацию молекул с высокими выходами и чистотой получаемых продуктов. 2019. Проведение исследований по масштабированию синтеза соединений-лидеров для обеспечения потребности проведения доклинических испытаний по стандартам GLP. |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Салахутдинов Н Ф |
| Ключевые слова: Медицинская химия химия природных соединений создание лекарственных препаратов |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Создание инновационных лекарственных средств для лечения и профилактики социально значимых заболеваний, в том числе для лечения онкологических, сердечно-сосудистых, нейродегенеративных, вирусных, инфекционных и ряда других заболеваний, а также анти-наркотических и анти-ВИЧ препаратов Развитие методов медицинской химии для обеспечения направленной модификации биологически активных веществ в целях создания перспективных лекарственных кандидатов, действующих на патогенез заболеваний Совершенствование методов синтеза стереоселективных фармпрепаратов Разработка теории и практики создания нового поколения мультимодальных препаратов, действующих одновременно на несколько значимых фармакологических мишеней Формирование фокусированных библиотек синтетических и природных биологически активных соединений Разработка новых оригинальных систем направленной доставки лекарственных препаратов к мишени, обеспечивающих высокую эффективность и безопасность фармпрепаратов с использованием природных комплексообразующих соединений, а также оригинальных полимерных носителей и наночастиц Химическое конструирование молекулярных сенсоров и индикаторов для диагностики социально значимых заболеваний человека |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Развитие существующей теории Патент Новые экспериментальные данные о природе и человеке. |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаборатория физиологически активных веществ |

 | ГРНТИ:* 31.23.17 "Терпены и родственные соединения"
* 31.23.21 "Алкалоиды"
* 31.23.39 "Кумарины, флавоноиды, антоцианины и родственные соединения"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Науки о жизни."

Критическая технология РФ:* 4 "Биомедицинские и ветеринарные технологии."

Технологическая платформа:* "Медицина будущего"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "6. Мультиплексные платформы для молекулярной диагностики онкологических, сердечно-сосудистых, аутоиммунных и инфекционных заболеваний"

Ключевые слова к теме (проекту):* Медицинская химия
* химия природных соединений
* создание лекарственных препаратов
 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) "Тема V.44.5.8 Дизайн и синтез новых карбо- и гетероциклических органических соединений с заданными функциональными свойствами" (0302-2016-0002) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 44 "Фундаментальные основы химии" |

 |

|  |
| --- |
| Дизайн и синтез новых оригинальных карбо- и гетероциклических соединений, включая (гетеро)ароматические, в том числе полифторированные и радикальные – перспективных компонент инновационных энергосберегающих молекулярных электронных и спинтронных функциональных материалов, в том числе наноматериалов: 1. Высокоспиновых органических веществ, включая (гетеро) циклические – парамагнитных лигандов для координационных соединений, компонентов парамагнитных жидких кристаллов, красителей и полимеров; 2. Парамагнитных молекулярных зондов и меток на основе нитроксильных радикалов, включая флуоресцентные; 3. Ди- и три- радикалов ряда пирролидина с различными линкерами и типом сочленения; жидкокристаллических нитроксильных радикалов ряда имидазолина; 4. Триарилметильных радикалов; их функциональных производных, включая водорастворимые узколиниевые радикалы; координационных соединений переходных металлов с хелатирующими триарилметильными радикальными лигандами; 5. Спин-меченных соединений на основе антиоксидантов с хромановым остовом и тритерпеноидов; 6. Полифторированных тер- и кватерфенилов, диарилалканов, алкиларилсульфоксидов и сульфонов, оксакаликсаренов и других функциональных фторорганических соединений; 7. Супрамолекулярных водородносвязанных ансамблей циклических полиэфиров с функционализованными полигалогеноаренами; 8. Хиральных соединений с (дигидро) пиразольным фрагментом, конденсированным с терпеновыми соединениями и других хиральнгых терпеновых производных; 9. Фторированных бензо-аннелированных аза-гетероциклов (имидазолов, триазолов, диазинов и других) с противоопухолевой активностью. |

 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 2017г. | 2018г. | 2019г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 45 | 50 | 55 |

 |

|  |
| --- |
| В 2017 г. будет осуществлен оригинальный химический синтез широких наборов специально сконструированных новых органических соединений 1-ого поколения – перспективных компонент инновационных энергосберегающих молекулярных электронных и спинтронных функциональных материалов, включая наноматериалы: 1. Высокоспиновых органических веществ, включая (гетеро) циклические – парамагнитных лигандов для координационных соединений, компонентов парамагнитных жидких кристаллов, красителей и полимеров; 2. Парамагнитных молекулярных зондов и меток на основе нитроксильных радикалов, включая флуоресцентные; 3.Ди- и три- радикалов ряда пирролидина с различными линкерами и типом сочленения; жидкокристаллических нитроксильных радикалов ряда имидазолина; 4. Триарилметильных радикалов; их функциональных производных, включая водорастворимые узколиниевые радикалы; координационных соединений переходных металлов с хелатирующими триарилметильными радикальными лигандами; 5. Спин-меченных соединений на основе антиоксидантов с хромановым остовом и тритерпеноидов; 6. Полифторированных тер- и кватерфенилов, диарилалканов, алкиларилсульфоксидов и сульфонов, оксакаликсаренов и других функциональных фторорганических соединений; 7. Супрамолекулярных водородносвязанных ансамблей циклических полиэфиров с функционализованными полигалогеноаренами; 8. Хиральных соединений с (дигидро) пиразольным фрагментом, конденсированным с терпеновыми соединениями и других хиральнгых терпеновых производных; 9. Фторированных бензо-аннелированных аза-гетероциклов (имидазолов, триазолов, диазинов и других) с противоопухолевой активностью. Будет проведена характеризация релевантных химических, физических и биологических свойств синтезированных соединений. 2018 г.: Оригинальный химический синтез широких наборов специально сконструированных новых органических соединений 2-ого поколения – перспективных компонент инновационных энергосберегающих молекулярных электронных и спинтронных функциональных материалов, включая наноматериалы, и характеризация их релевантных химических и физических свойств 2019 г.: Оригинальный химический синтез широких наборов специально сконструированных новых органических соединений 3-ого поколения – перспективных компонент инновационных энергосберегающих молекулярных электронных и спинтронных функциональных материалов, включая наноматериалы, и характеризация их релевантных химических и физических свойств |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Зибарев А В |
| Ключевые слова: зависимости структура - свойства химический синтез |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Природа химической связи, реакционная способность и механизмы реакции основных классов химических соединений Проведение комплексных теоретических и экспериментальных исследований химического строения и реакционной способности веществ, которые позволят получить фундаментальные научные знания о химических превращениях и физико-химических свойствах веществ, создать новые химические процессы, и перспективные материалы, включая наноматериалы, для нужд энергетики, электроники, медицины, оборонной техники, рационального природопользования, транспорта, авиации, информационных, коммуникационных и космических систем Разработка новых селективных методов синтеза химических соединений, веществ и материалов с практически полезными свойствами, установление фундаментальных закономерностей «структура-свойство», разработка новых физико-химических методов анализа Экспериментальные и теоретические исследования строения, реакционной способности и практически важных свойств металло-, бор-, фтор- и фосфорорганических соединений в целях получения фундаментальных научных знаний о природе химической связи и химических превращениях, которые будут использованы для разработки новых химических процессов и перспективных материалов Методология синтеза новых органических, элементоорганических, неорганических и полимерных веществ, создание новых высокоэффективных каталитических систем Разработка методов направленного синтеза замещенных полигалогенсодержащих органических, металлоорганических и элементоорганических, халькоген-азотных, халькоген-органических соединений и стабильных радикалов |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Развитие существующей теории Новые экспериментальные данные о природе и человеке. |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаборатория гетероциклических соединений, |
| Лаборатория галоидных соединений |
| Лаборатория азотистых соединений |
| Лаборатория промежуточных продуктов |
| Лаборатория терпеновых соединений |
| Лаборатория экологических исследований и хроматографического анализа |
| Группа металлокомплексного катализа |
| Группа функциональных материалов |
| Группа изучения механизмов органических реакций |
| Лаборатория изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций |
| Центр спектральных исследований |

 | ГРНТИ:* 31.15.15 "Исследования строения и свойств молекул и химической связи"
* 31.21.17 "Реакционная способность"
* 31.21.19 "Общие синтетические методы"
* 31.21.25 "Ароматические соединения"
* 31.21.27 "Гетероциклические соединения"
* 31.21.29 "Элементоорганические соединения"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика."

Критическая технология РФ:* 17 "Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов."

Технологическая платформа:* "Инновационные лазерные, оптические и оптоэлектронные технологии – фотоника"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "1. Исследование, разработка и создание новых поколений систем, приборов, устройств и их компонентов на базе технологий нано- и микросистемной техники"

Ключевые слова к теме (проекту):* Молекулярный дизайн
* химический синтез
* органические соединения
* органическая электроника
* органическая спинтроника
* функциональные материалы
* молекулярные материалы
* энергосберегающие материалы
* инновационные материалы
 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований (ГП 14) по теме (проекту) "Тема 48.1.4. Изучение фармакологической активности, механизма действия , токсичности синтетических и природных соединений и материалов." (0302-2016-0001) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 48 "Фундаменталь-ные физико-химичес-кие исследования механизмов физиологических процессов и создание на их основе фармакологических веществ и лекарственных форм для лечения и профилактики социально значимых заболеваний" |

 |

|  |
| --- |
| 2017-2019 1. Прогнозирование фармакологической активности библиотек новых соединений природного и синтетического происхождения, изучение особенностей взаимодействия фармакологически перспективных агентов, молекулярных механизмов действия и сайтов связывания известных ферментов, участвующих в патогенезе социально значимых заболеваний. 2. Исследование противоязвенной, противовоспалительной , органопротекторной активности новых производных высших терпеноидов и фенольных соединений . 3. Скрининг перспективных ЦНС-активных, анальгетических агентов с применением широкого арсенала современных методов и моделей. 4. Тестирование и отбор агентов, проявляющих влияние на сердечно-сосудистую систему среди производных лаппаконитина производных полигетероциклических соединений. 5. Скрининг перспективных гиполипидемических и гипогликемических агентов . 6. Изучение фармакологических свойств новых оригинальных форм доставки лекарственных препаратов к мишени с использованием природных комплексообразующих соединений, а также наночастиц. 7. Изучение гистохимических и патоморфометрических изменений структуры органа-мишени под влиянием новых высокоактивных соединений. 8. Оценка основных фармакокинетических параметров препаратов-кандидатов для лечения различных заболеваний. 9. Токсико-фармакологический скрининг новых соединений, полученных в результате целенаправленного органического синтеза. |

 |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 2017г. | 2018г. | 2019г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 8 | 10 | 10 |

 |

|  |
| --- |
| В 2017 году будут получены научные результаты для новых соединений, полученных химиками НИОХ СО РАН в 2016-2017 г по направлениям: 1.Модели молекулярных механизмов действия новых производных кумаринов, лупанового, урсанового ряда диеновых кислот, нафтохинона, ксантинов, а также фторированных дигидро-1,4-бензотиазинов и их полигетероциклических и др. производных. 2. Выбор среди тритерпеноидов и производных п-тирозола перспективных антиульцероген-ных, противовоспалительных , органопротекторных агентов, проявляющих высокую активность на фоне острого и хронического патологических процессов. 3. Данные об анальгетической и психотропной активности новых производных, содержащих моно- и дитерпеновые фрагменты. Выбор перспективного агента для дальнейшего более углублённого исследования. 4. Выбор наиболее перспективных агентов, проявляющих высокую антиаритмическую гипотензивную и гипертензивную и кардиотропную активности 5. Данные об антихолестеринимической и антигликемической активности производных берберина, глитазара и глиптина, выбор соединений, проявляющих наиболее выраженную активность. 6. Будут проведены исследования по изучению токсико- фармакологических свойств наноаэрозольных форм противотуберкулезных, психотропных, противовоспалительных и др. средств. Будут получены данные о фармакологических свойствах комплексов с различными группами лекарственных препаратов с полисахаридом арабиногалактаном, натриевой и аммонийной солями глицирризиновой кислоты и выбор на их основе перспективных наноструктурированных лекарственных средств. 7. Данные патоморфологического анализа, позволяющие установить токсико-фармакологическое воздействие новых агентов на структуру органа-мишени (печень, желудок, легкие, почки, мозг). 8. Разработка методик пробоподготовки образцов биологического материала для проведения фармако-кинетических исследований. 9. Выявление высокоэффективных агентов для углублённого фармакологического исследования. В 2018 году будут получены научные результаты для новых соединений, полученных химиками НИОХ СО РАН в 2017-2018 г по направлениям: 1.Модели молекулярных механизмов действия новых производных кумаринов, лупанового, урсанового ряда диеновых кислот, нафтохинона, ксантинов, а также фторированных дигидро-1,4-бензотиазинов и их полигетероциклических и др. производных. 2. Выбор среди тритерпеноидов и производных п-тирозола перспективных антиульцероген-ных, противовоспалительных , органопротекторных агентов, проявляющих высокую активность на фоне острого и хронического патологических процессов. 3. Данные об анальгетической и психотропной активности новых производных, содержащих моно- и дитерпеновые фрагменты. Выбор перспективного агента для дальнейшего более углублённого исследования. 4. Выбор наиболее перспективных агентов, проявляющих высокую антиаритмическую гипотензивную и гипертензивную и кардиотропную активности 5. Данные об антихолестеринимической и антигликемической активности производных берберина, глитазара и глиптина, выбор соединений, проявляющих наиболее выраженную активность. 6. Будут проведены исследования по изучению токсико- фармакологических свойств наноаэрозольных форм противотуберкулезных, психотропных, противовоспалительных и др. средств. Будут получены данные о фармакологических свойствах комплексов с различными группами лекарственных препаратов с полисахаридом арабиногалактаном, натриевой и аммонийной солями глицирризиновой кислоты и выбор на их основе перспективных наноструктурированных лекарственных средств. 7. Данные патоморфологического анализа, позволяющие установить токсико-фармакологическое воздействие новых агентов на структуру органа-мишени (печень, желудок, легкие, почки, мозг). 8. Разработка методик пробоподготовки образцов биологического материала для проведения фармако-кинетических исследований. 9. Выявление высокоэффективных агентов для углублённого фармакологического исследования. В 2019 году будут получены научные результаты для новых соединений, полученных химиками НИОХ СО РАН в 2018-2019 г по направлениям: 1.Модели молекулярных механизмов действия новых производных кумаринов, лупанового, урсанового ряда диеновых кислот, нафтохинона, ксантинов, а также фторированных дигидро-1,4-бензотиазинов и их полигетероциклических и др. производных. 2. Выбор среди тритерпеноидов и производных п-тирозола перспективных антиульцероген-ных, противовоспалительных , органопротекторных агентов, проявляющих высокую активность на фоне острого и хронического патологических процессов. 3. Данные об анальгетической и психотропной активности новых производных, содержащих моно- и дитерпеновые фрагменты. Выбор перспективного агента для дальнейшего более углублённого исследования. 4. Выбор наиболее перспективных агентов, проявляющих высокую антиаритмическую гипотензивную и гипертензивную и кардиотропную активности 5. Данные об антихолестеринимической и антигликемической активности производных берберина, глитазара и глиптина, выбор соединений, проявляющих наиболее выраженную активность. 6. Будут проведены исследования по изучению токсико- фармакологических свойств наноаэрозольных форм противотуберкулезных, психотропных, противовоспалительных и др. средств. Будут получены данные о фармакологических свойствах комплексов с различными группами лекарственных препаратов с полисахаридом арабиногалактаном, натриевой и аммонийной солями глицирризиновой кислоты и выбор на их основе перспективных наноструктурированных лекарственных средств. 7. Данные патоморфологического анализа, позволяющие установить токсико-фармакологическое воздействие новых агентов на структуру органа-мишени (печень, желудок, легкие, почки, мозг). 8. Разработка методик пробоподготовки образцов биологического материала для проведения фармако-кинетических исследований. 9. Выявление высокоэффективных агентов для углублённого фармакологического исследования. |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Толстикова Татьяна Генриховна |
| Ключевые слова: перспективные фармакологические агенты на основе новых соединений токсико-фармакологическое воздействие на орган-мишень молекулярные модели механизмов взаимодействия биомишени и перспективных фармакологических агентов наноструктурированные лекарственные препараты наноаэрозольные формы доставки |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Создание инновационных лекарственных средств для лечения и профилактики социально значимых заболеваний, в том числе для лечения онкологических, сердечно-сосудистых, нейродегенеративных, вирусных, инфекционных и ряда других заболеваний, а также анти-наркотических и анти-ВИЧ препаратов Развитие методов компьютерного молекулярного дизайна, включая методы квантовой химии и молекулярной динамики, для предсказания структуры и свойств новых биологически активных веществ Создание обобщенных количественных представлений о взаимодействии «лекарственная молекула - биомишень», создание молекулярных моделей биомишеней для «докинга» потенциальных лекарственных веществ Обеспечение доклинических испытаний в соответствии с установленными стандартами GLP вновь синтезированных оригинальных соединений и веществ природного происхождения Разработка новых оригинальных систем направленной доставки лекарственных препаратов к мишени, обеспечивающих высокую эффективность и безопасность фармпрепаратов с использованием природных комплексообразующих соединений, а также оригинальных полимерных носителей и наночастиц Повышение эффективности действия химиотерапевтических агентов, радиоактивных изотопов и суицидных генов в результате их направленного транспорта к злокачественным клеткам с помощью природных и эндогенных белков, синтетических водорастворимых полимеров и липофильных катионов |
| Тип результата: Развитие существующей теории Патент Новые экспериментальные данные о природе и человеке. Новые медицинские технологии (методы диагностики, лечения и реабилитации, методы профилактики, методы лабораторного исследования) |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаб. фармакологических исследований |
| Лаб. физиологически активных веществ |
| Лаб. медицинской химии |
| Лаб. промежуточных продуктов |
| Лаб. азотистых соединений |
| Лаборатория изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций |
| Лаборатория гетероцикличе-ских соединений |
| Опытный химический цех |
| Центр спектральных исследований |

 | ГРНТИ:* 34 "Биология"
* 34.45 "Фармакология"
* 34.45.05 "Методы доклинического исследования и отбора лекарственных средств"
* 34.45.15 "Общая фармакология"
* 34.45.21 "Частная фармакология"
* 34.47 "Токсикология"
* 34.47.15 "Общая токсикология"
* 34.47.21 "Частная токсикология"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Науки о жизни."

Критическая технология РФ:* 4 "Биомедицинские и ветеринарные технологии."
* 22 "Технологии снижения потерь от социально значимых заболеваний."

Технологическая платформа:* "Медицина будущего"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "6. Мультиплексные платформы для молекулярной диагностики онкологических, сердечно-сосудистых, аутоиммунных и инфекционных заболеваний"

Ключевые слова к теме (проекту):* изучение фармакологической активности
* изучение токсико-фармакологических свойств
* тестирование и отбор
* молекулярное моделирование взаимодействий биомишени и перспективных фармакологических агентов
* новые формы доставки лекарственных средств
 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований по программам РАН по теме (проекту) "Теоретический дизайн, синтез, исследование структуры, спектроскопии и магнитных свойств комплексов d- и f-металлов с редокс-активными халькоген-азотными лигандами. Комплексная программа СО РАН № II.2." (0302-2015-0004) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 45 "Научные основы создания новых материалов с заданными свойствами и функциями, в том числе высокочистых и наноматериалов" |

 |

|  |
| --- |
| Молекулярный дизайн и синтез новых халькоген-азотных гетероциклов – редокс-активных лигандов для комплексов d- и f-металлов и электрохимическое изучение их окислительно-восстановительных свойств. |

 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2016г. | 2017г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 1 | 1 |

 |

|  |
| --- |
| 2016 год. 1. Синтез, экспериментальные и теоретические (на основании квантово-химических расчетов) данные о структуре и свойствах новых магнитно-активных комплексов d- и f-металлов. 2. Рекомендации по синтезу комплексов, обладающих свойствами (одно)молекулярных магнетиков.**2017 год. Теоретическое конструирование и химический синтез новых редокс-активных халькоген-азотных гетероциклов (1,2,5-халькогенадиазолов, 1,2,3-дихалькогеназолов и других) с положительным сродством к электрону – лигандов для магнитно-активных комплексов переходных металлов** |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Зибарев Андрей Викторович |
| Ключевые слова: молекулярный дизайн и синтез новых магнитно-активных комплексов d- и f-металлов зависимости структура - свойства новые комплексы - перспективные (одно)молекулярные магнетики |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Получение принципиально новых фундаментальных знаний о строении металлических, керамических, природных и синтетических полимерных наноструктур и композитов |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Развитие существующей теории Новый материал |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаб. гетероциклических соединений |

 | ГРНТИ:* 31.15.33 "Электрохимия"
* 31.17.29 "Комплексные соединения"
* 31.21.29 "Элементоорганические соединения"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика."

Критическая технология РФ:* 17 "Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов."

Технологическая платформа:* "Инновационные лазерные, оптические и оптоэлектронные технологии – фотоника"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "1. Исследование, разработка и создание новых поколений систем, приборов, устройств и их компонентов на базе технологий нано- и микросистемной техники"

Ключевые слова к теме (проекту):* синтез новых халькоген-азотных гетероциклов
* структура и свойства новых магнитно-активных комплексов d- и f-металлов
* квантово-химические методы
 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований по программам РАН по теме (проекту) "Совместные проекты фундаментальных исследований НАН Беларуси и СО РАН. Проект № 12. Химические модификации растительных метаболитов терпеновой и поликетидной природы с целью получения новых политаргетных биомолекул с противовоспалительным и противоопухолевым действием. Комплексная программа СО РАН № II.2." (0302-2015-0003) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 48 "Фундаменталь-ные физико-химичес-кие исследования механизмов физиологических процессов и создание на их основе фармакологических веществ и лекарственных форм для лечения и профилактики социально значимых заболеваний" |

 |

|  |
| --- |
| 2015-2016 г. 1. Разработка методов синтеза новых коньюгатов тритерпеноидов ряда лупана и урсана с фармакофорными компонентами дитиолтионов и родственной структуры. Изучение возможных молекулярных мишений агентов методом молекулярного докинга. 2. Получение и превращения амидов бетулоновой, фломизоиковой и ламбертиановой кислот. Масштабирование синтеза наиболее перспективных соединений. 3. Проведение скрининга in vivo противовоспалительных свойств перспективных производных урсана и лупана с использованием моделей острого эксудативного воспаления. 2017 г. 1. Синтез конъюгатов высших терпеноидов (бетулина аллобетулина, бетулоновой, урсоловой кислот) с производными фуроксана. Оценка противовоспалительной активности наиболее активного амида урсоловой кислоты на ЛПС-стимулированных макрофагах; изменение относительного уровня экспрессии м-РНК генов ИЛ-10, ФНОα, ИЛ-1 под действием нового амида. 2. Синтез кумарино-халконовых гибридов и димерных кумаринов с помощью реакций кросс-сочетания и 1,3-диполярного циклоприсоединения. 3. Исследование противоопухолевой активности производных фломизоиковой кислоты в моделях invitro и in vivo, в том числе в комбинации с противоопухолевымицитостатиками на опухолевой модели, резистентной к химиотерапии. 4. Исследование цитостатической активности гибридов-тритерпеноидов с простаноидными структурами на клеточных культурах злокачественной глиомы и опухоли молочной железы MCF7 |

 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2016г. | 2017г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 1 | 4 |

 |

|  |
| --- |
| 2015-2016 1. Синтез библиотек гибридных соединений, включающих структурные фрагменты со свойствами доноров сероводорода и нестероидных противовоспалительных агентов. Получение данных о цитотоксической активности новых производных по отношению к опухолевым клеткам человека. 2. Разработка способа получения амида фломизоиковой кислоты и селективные превращения амидов бетулоновой, фломизоиковой и ламбертиановой кислот. Подготовка регламента синтеза бетамида. 3. Получение данных о противовоспалительной активности агентов на специфических моделях иммунногенного воспаления. Оценка влияния соединений на гуморальное и клеточное звено воспалительной реакции. **2017 1. Синтез библиотек гибридных соединений, включающих структурные фрагменты со свойствами доноров NO и тритерпеноидов. Получение данных о противовоспалительной и цитотоксической активности. Получение данных о механизме противовоспалительной активности (при обнаружении таковой). 2. Получение фундаментальных данных o каталитических реакциях образования С-С связи c участием производных кумаринов. 3. Получение данных о специфической биологической активности амидов фломизоиковой кислоты. 4. Получение данных об активности in silico и in vitro для тритерпеноидных поликетидов нового структурного типа.** |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Шульц Эльвира Эдуардовна |
| Ключевые слова: синтез новых соединений - производных растительных метаболитов противовоспалительная и противоопухолевая активность зависимость строение - активность |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Создание инновационных лекарственных средств для лечения и профилактики социально значимых заболеваний, в том числе для лечения онкологических, сердечно-сосудистых, нейродегенеративных, вирусных, инфекционных и ряда других заболеваний, а также анти-наркотических и анти-ВИЧ препаратов Развитие методов компьютерного молекулярного дизайна, включая методы квантовой химии и молекулярной динамики, для предсказания структуры и свойств новых биологически активных веществ Создание обобщенных количественных представлений о взаимодействии «лекарственная молекула - биомишень», создание молекулярных моделей биомишеней для «докинга» потенциальных лекарственных веществ Развитие методов медицинской химии для обеспечения направленной модификации биологически активных веществ в целях создания перспективных лекарственных кандидатов, действующих на патогенез заболеваний Разработка теории и практики создания нового поколения мультимодальных препаратов, действующих одновременно на несколько значимых фармакологических мишеней |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Новые средства профилактики и лечения (препараты крови, антибиотики, вакцины, лекарственные препараты и средства, БАД, продукты питания, вакцина, диагностикум, дезинфицирующие средства), новые препараты защиты растений, животных |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаб. медицинской химии |
| Лаб. фармакологических исследований |
| Технологический отдел опытного химического производства |

 | ГРНТИ:* 31.21.19 "Общие синтетические методы"
* 31.23.17 "Терпены и родственные соединения"
* 34.45.05 "Методы доклинического исследования и отбора лекарственных средств"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Науки о жизни."

Критическая технология РФ:* 4 "Биомедицинские и ветеринарные технологии."

Технологическая платформа:* "Медицина будущего"
* "Биоиндустрия и биоресурсы - БиоТех2030"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "7. Персонализированная медицина социально значимых и орфанных заболеваний эндокринной системы"

Ключевые слова к теме (проекту):* разработка методов синтеза
* производные растительных метаболитов
* метод молекулярного докинга
* скрининга in vivo фармакологической активности
 |  |

|  |
| --- |
|  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований по программам РАН по теме (проекту) "Изучение фундаментальных закономерностей реакционой способности протобербериновых адкалоидов на примере берберина. Синтез и изучение гиполипидемической активности производных берберина. Комплексная программа СО РАН № II.2." (0302-2015-0002) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 48 "Фундаменталь-ные физико-химичес-кие исследования механизмов физиологических процессов и создание на их основе фармакологических веществ и лекарственных форм для лечения и профилактики социально значимых заболеваний" |

 |

|  |
| --- |
| Выявление закономерностей реакционной способности протобербериновых алкалоидов и получение на их основе гиполипидемических агентов нового поколения. |

 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2016г. | 2017г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 1 | 1 |

 |

|  |
| --- |
| 2015-2016 1. Разработка методов синтеза стартовых производных берберина и их наработка в количестве, необходимом для проведения дальнейших синтетических трансформаций. 2. Проведение математического моделирования in silico для виртуальных библиотек производных берберина, прогнозирование гиполипидемической активности и QSAR анализ. 3. Изучение взаимодействия стартовых производных берберина с галогенангидридами фтор-замещенных арилсульфонов, получение 9-О-сульфоэфиров берберина. 4. Исследование синтезированных производных берберина на способность к экспрессии гена рецепторов ЛПНП. 5. Исследование синтезированных производных берберина на модели Тритон-индуцированнной гиперлипидемии. **2017 1. Изучение взаимодействия производных берберрубина с ароматическими амидами бромуксусной и 2-бромизомасляной кислоты. Восстановление полученных амидов в производные тетрагидроберберина. 2. Разработка подходов к введению азотсодержащей функции в молекулу берберина 3. Исследование синтезированной библиотеки ароматических и восстановленных амидных производных берберина на способность к экспрессии гена рецепторов ЛПНП. 4. Исследование синтезированной библиотеки ароматических и восстановленных амидных производных берберина на гиполипидемическую способность на модели Тритон-индуцированной гиперлипидемии.** |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Салахутдинов Нариман Фаридович |
| Ключевые слова: синтез новых производных берберина способность к экспрессии гена рецепторов ЛПНП прогноз гиполипидемической активности и QSAR анализ зависимость строение - активность |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Развитие методов компьютерного молекулярного дизайна, включая методы квантовой химии и молекулярной динамики, для предсказания структуры и свойств новых биологически активных веществ Создание обобщенных количественных представлений о взаимодействии «лекарственная молекула - биомишень», создание молекулярных моделей биомишеней для «докинга» потенциальных лекарственных веществ Развитие методов медицинской химии для обеспечения направленной модификации биологически активных веществ в целях создания перспективных лекарственных кандидатов, действующих на патогенез заболеваний |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Новые средства профилактики и лечения (препараты крови, антибиотики, вакцины, лекарственные препараты и средства, БАД, продукты питания, вакцина, диагностикум, дезинфицирующие средства), новые препараты защиты растений, животных |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаб. физиологически активных веществ |

 | ГРНТИ:* 31.21.19 "Общие синтетические методы"
* 31.23.21 "Алкалоиды"
* 34.45.05 "Методы доклинического исследования и отбора лекарственных средств"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Науки о жизни."

Критическая технология РФ:* 4 "Биомедицинские и ветеринарные технологии."

Технологическая платформа:* "Медицина будущего"
* "Биоиндустрия и биоресурсы - БиоТех2030"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "7. Персонализированная медицина социально значимых и орфанных заболеваний эндокринной системы"

Ключевые слова к теме (проекту):* синтез новых производных берберина
* исследования in vivo гиполипидемической активности
* строение и биологическая активность новых соединений
* методы QSAR-анализа и молекулярного моделирования
 |  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Выполнение фундаментальных научных исследований по программам РАН по теме (проекту) "Фтор- и цианзамещенные нитронилнитроксилы. Комплексная программа СО РАН № II.2." (0302-2015-0001) *Работа включена в проект Плана НИР и государственного задания на 2017 год* |

|  |
| --- |
| Раздел 5 "Химические науки и науки о материалах": |
| Подраздел 44 "Фундаментальные основы химии" |

 |

|  |
| --- |
| 2016 1. Генерирование карбанионных синтонов из нитронилнитроксильных радикалов и исследование их реакционной способности по отношению к фторированным ароматическим субстратам. 2. Азотсодержащие гетероциклические радикальные системы, электронное и пространственное строение, связь с физико-химическими свойствами. 2017 "Химия парамагнитных сопряженных систем. Комплексная программа СО РАН № II.2." 1. Исследование реакционной способности и синтетического потенциала долгоживущих анионных форм цианаренов и нитронилнитроксильных радикалов. 2. Азотсодержащие гетероциклические радикальные системы: исследование влияния заместителей на строение потенциальных поверхностей. 3. Фотокаталитичское генерирование ароматических анион-радикалов и их синтетическое использование. |

 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | 2016г. | 2017г. |
| Количество научных публикаций в журналах, индексируемых в российских и международных информационно-аналитических системах научного цитирования (Web of Science, Scopus, MathSciNet, Российский индекс научного цитирования, Google Scholar, European Reference Index for the Humanities и др.) (единиц) | 1 | 2 |

 |

|  |
| --- |
| 2016 год 1. Условия препаративного генерирования парамагнитных С-анионов из нитронилнитроксильных радикалов. Оценка возможности их вовлечения как нуклеофилов в реакции с фторированными бензонитрилами. 2. Квантово-химический анализ строения потенциальных поверхностей пятичленных азотсодержащих (ион)радикалов и выявлены объекты, интересные для экспериментальных исследований **2017 год 1. Будет исследована возможность использования анионныхинтермедиатов кросс-сочетания цианареновв качестве нуклеофильных синтонов ароматического замещения.Будет изучен характер реакционной способности литиированного производного 4,4,5,5-тетраметил-4,5-дигидро-1H-имидазол-3-оксид-1-оксила по отношению к тетрафторфталонитрилу и на этой основе предложен новый подход к синтезу спинмеченых фторированных фталонитрилов. 2. Квантово-химическое изучение потенциальных поверхностей пятичленных азотсодержащих радикальных систем с заместителями (CN, NH2, F, CH3, СF3 и др.). Оценка возможности направленного влияния на спектральные и химические свойства. 3. Будет изучено генерирование анион-радикалов акцепторно замещенных аренов и их использование для фукционализации третичных аминов в условиях фотокатализа фенилпиридильными комплексами иридия.** |
| Характеристика:Фундаментальный результат с выходом в прикладной результат |
| Руководитель: Пантелеева Елена Валерьевна |
| Ключевые слова: разработка метода препаративного генерирования парамагнитных карбанионов реакционная способность по отношению к фторированным бензонитрилам строение потенциальных поверхностей пятичленных азотсодержащих (ион)радикалов |
| Результаты изпрограммы ФНИ: Природа химической связи, реакционная способность и механизмы реакции основных классов химических соединений Проведение комплексных теоретических и экспериментальных исследований химического строения и реакционной способности веществ, которые позволят получить фундаментальные научные знания о химических превращениях и физико-химических свойствах веществ, создать новые химические процессы, и перспективные материалы, включая наноматериалы, для нужд энергетики, электроники, медицины, оборонной техники, рационального природопользования, транспорта, авиации, информационных, коммуникационных и космических систем Методология синтеза новых органических, элементоорганических, неорганических и полимерных веществ, создание новых высокоэффективных каталитических систем |
| Тип результата: Новые знания об основных закономерностях строения вещества, функционирования и развития человека, общества, окружающей среды и Вселенной Развитие существующей теории Новый материал |
|  |

 |

|  |
| --- |
| Лаб. изучения нуклеофильных и ион-радикальных реакций |
| Лаб. электрохимически активных соединений и материалов |
| Группа изучения механизмов органических реакций |

 | ГРНТИ:* 31.21.17 "Реакционная способность"
* 31.21.18 "Механизмы органических реакций"

Приоритетное направление развития науки,технологий и техники в РФ:* "Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика."

Критическая технология РФ:* 17 "Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов."

Технологическая платформа:* "Новые полимерные композиционные материалы и технологии"

Научные задачи, решаемые с задействованием возможностей ЦКП:* "1. Исследование, разработка и создание новых поколений систем, приборов, устройств и их компонентов на базе технологий нано- и микросистемной техники"

Ключевые слова к теме (проекту):* азотсодержащие гетероциклические радикалы
* строение и свойства радикальных систем
* генерирование и химические свойства карбанионов
* квантово-химический анализ
 |  |