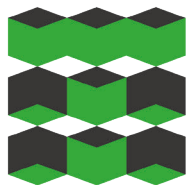

**TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY**



**ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

МАТЕРИАЛЫ

**XXV Юбилейной Международной научно-практической
конференции студентов и молодых ученых**

**ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ**

ТОМ 1

ХХТ-2024

**20 – 24 мая 2024 г.
г. Томск**

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА НОВЫХ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ШКОЛА ХИМИЧЕСКИХ И БИОМЕДИЦИНСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ

Материалы
XXV Юбилейной Международной научно-практической конференции
студентов и молодых ученых
имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера,
посвященной 100-летию со дня рождения
профессора В.П. Лопатинского

Том 1

20–24 мая 2024 г.

Томск 2024

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0
Х46

Х46 **Химия и химическая технология в XXI веке** : материалы XXV Юбилейной Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 100-летию со дня рождения профессора В.П. Лопатинского. В 2 томах. Том 1 (г. Томск, 20–24 мая 2024 г.). / Томский политехнический университет. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2024. – 458 с.

ISBN 978-5-4387-1195-7 (т. 1)
ISBN 978-5-4387-1194-0

В сборнике представлены материалы XXV Юбилейной Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке». В материалах конференции обсуждаются различные проблемы современной химической науки. Большое внимание уделено малотоннажным химическим производствам. Описаны новые подходы к лабораторному синтезу специальных материалов, к анализу их свойств. Значительная часть работ посвящена исследованию объектов окружающей среды, в том числе и расположенных за рубежом. Ряд работ молодых ученых выполнен на английском языке и посвящен самым разнообразным проблемам химической технологии. Большой интерес представляют работы школьников, посвященные природным объектам и синтезу химических соединений.

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0

Оргкомитет
конференции:

634050, Томск, пр. Ленина, 43а, ТПУ, ауд. 136,
ОХИ ИШПР ТПУ
Тел. +7-913-809-91-17
e-mail: orgcomННТ@tpu.ru
hht.tpu.ru

ISBN 978-5-4387-1195-7 (т. 1)
ISBN 978-5-4387-1194-0

© ФГАОУ ВО НИ ТПУ, 2024

BODIPY с дальнейшим нитрозированием. Для **BODIPY-NOD-4** и **NOD-5** вторичные амины предварительно взаимодействовали с MeMgI для замены атомов фтора на метильные группы.

Были исследованы фотофизические и фотохимические свойства полученных соединений, в зависимости от заместителей в ядре хромофора и при атоме бора. **BODIPY-NOD-2** оказался наиболее эффективным донором (Φ_{NO} (EtOH) = $5,5 \cdot 10^{-4}$). Замена атомов фтора на метильные группы в случае **BODIPY-NOD-4** привела к уменьшению скорости выделения NO . В случае йод-производных, **BODIPY-NOD-3** наряду с выделением NO генерировал синглетный кис-

лород, а его аналог **BODIPY-NOD-5** не выделял оксида азота. С помощью **BODIPY-NOD-2** была продемонстрирована возможность фотозактивации тромбоцитов.

Также были получены ПДМС (полидиметилсилоксан) полимер, допированный синтезированным донором **BODIPY-NOD-2**. Было установлено, что внедрение донора в полимерный материал увеличивает эффективность фотовыделения NO , а также увеличивает время его высвобождения после прекращения облучения.

Исследование поддержано Российский Научным Фондом (№ гранта 23-75-10049).

Список литературы

1. Loscalzo J. Nitric oxide and its role in the cardiovascular system / J. Loscalzo, G. Welch // *Progress in Cardiovascular Diseases*. – 1995. – Vol. 38. – № 2. – P. 87–104.
2. Nitric Oxide: The Versatility of an Extensive Signal Molecule / L. Lamattina, C. Garcia-Mata, M. Graziano, G. Pagnussat // *Annual Review of Plant Biology*. – 2003. – Vol. 54. – Nitric Oxide. – № 1. – P. 109–136.
3. Velayutham M. Nitric Oxide Signaling in Biology / M. Velayutham, J. L. Zweier // *Messenger*. – 2013. – Vol. 2. – № 1. – P. 1–18.

ХАЛЬКОНИЕВЫЕ И ГАЛОНИЕВЫЕ СОЛИ КАК ЭФФЕКТИВНЫЕ ОРГАНОКАТАЛИЗАТОРЫ ДЛЯ РЕАКЦИЙ ЭЛЕКТРОФИЛЬНОЙ АКТИВАЦИИ КАРБОНИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

И. О. Путнин, А. А. Сысоева

Научный руководитель – д.х.н., доцент Д. С. Болотин

Санкт-Петербургский государственный университет

Институт химии

199034, st117584@student.spbu.ru

Халькониевые и галониевые соли становятся всё более востребованными соединениями в органическом синтезе в качестве нековалентных органокаatalизаторов за счёт своих преимуществ перед традиционными металлокомплексными катализаторами, а именно низкой чувствительности к влаге и воздуху. На основании результатов квантово-химических расчётов в нашей предыдущей работе [1] было показано, что каталитическая активность халькониевых и галониевых солей возрастает с увеличением электростатического потенциала на σ -дырке атома халькогена/галогена (V_s^{max}).

В данной работе экспериментально проверены результаты квантово-химических расчётов о влиянии значения потенциала на каталитическую активность халькониевых (S^{OTf} , Se^{OTf} ,

Te^{OTf}) и галониевых солей (Cl^{OTf} , Br^{OTf} , I^{OTf}) на примере модельной реакции нуклеофильного присоединения анилина к 4-метилбензальдегиду с образованием соответствующего имина (Рисунок 1).

По результатам проведённых экспериментов в случае каждого катализатора рассчитаны энергии Гиббса активации реакции (ΔG^\ddagger), изменение энергии Гиббса активации ($\Delta \Delta G^\ddagger$) и константы скорости прямой реакции (k): для S^{OTf} , Se^{OTf} и Te^{OTf} значения при 25 °C составили $8,11 \cdot 10^{-5}$, $6,90 \cdot 10^{-5}$ и $4,33 \cdot 10^{-4} \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$, соответственно, для Cl^{OTf} , Br^{OTf} и I^{OTf} – $1,29 \cdot 10^{-4}$, $9,88 \cdot 10^{-5}$ и $1,15 \cdot 10^{-3} \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$, соответственно. Значения k определены согласно кинетическим уравнениям для обратимых реакций 2-го порядка. Значения ΔG^\ddagger рассчитаны согласно уравнению Эйринга.

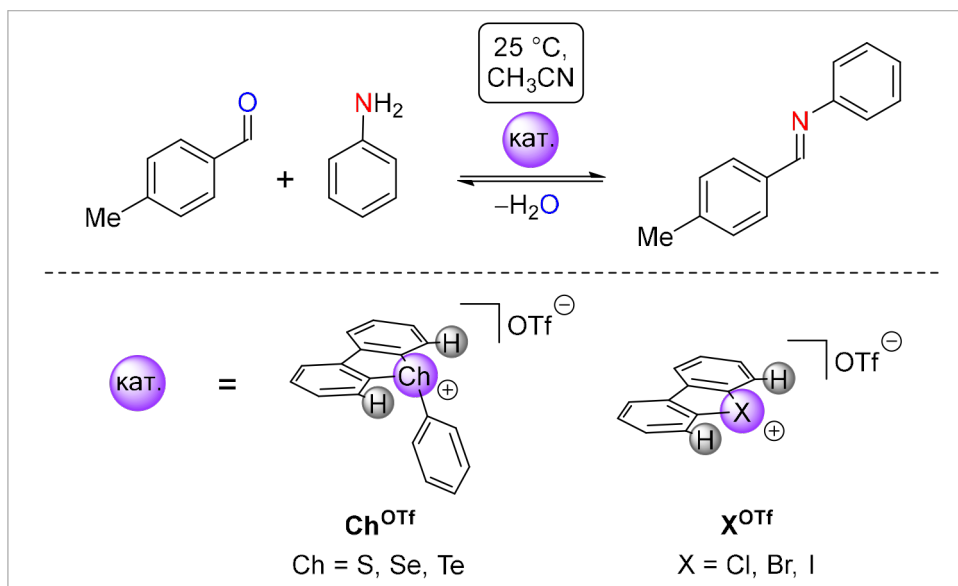


Рис. 1. Модельная реакция и структуры исследуемых катализаторов S^{OTf} , Se^{OTf} , Te^{OTf} , Cl^{OTf} , Br^{OTf} , I^{OTf}

Значения $\Delta\Delta G^\ddagger$ рассчитаны как разница между ΔG^\ddagger реакции, протекающей без катализатора, и ΔG^\ddagger реакции, протекающей в присутствии катализатора.

В ходе сделанной работы установлено, что величина $\Delta\Delta G^\ddagger$ возрастает с увеличением электростатического потенциала на σ -дырке гетероатома катализатора (V_s^{max}), что согласуется с расчётными данными, представленными в публикации [1] (Рисунок 2).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 20-73-10013) и СПбГУ (грант 103922061) с использованием оборудования ресурсных центров Научного парка СПбГУ «Магнитно-резонансные методы исследования» и «Методы анализа состава вещества».

Список литературы

1. A.S. Novikov, D.S. Bolotin. // *Org. Biomol. Chem.*, 2022. – 20. – P. 7632–7639.

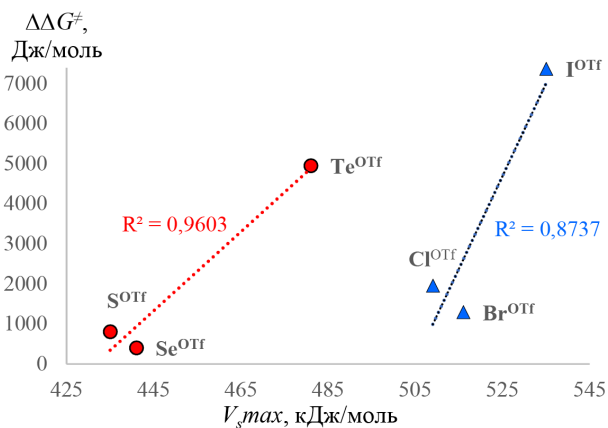


Рис. 2. Влияние V_s^{max} на величину $\Delta\Delta G^\ddagger$ модельной реакции

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ГИБРИДНЫХ ДОНОРОВ ГАЛОГЕННЫХ СВЯЗЕЙ НА ОСНОВЕ ФТОРИРОВАННЫХ АРИЛИОДИДОВ

А. Д. Раджабов

Научный руководитель – к.х.н., доцент Н. С. Солдатова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, Томск, проспект Ленина, 30

За последние десятилетия возросло внимание к области гипервалентного иода из-за уникальных свойств этого типа соединений. Одним

из наиболее изучаемых классов соединений в этой области являются диарилиодониевые соли (ДАИС). Диарилиодониевые соли широко при-