



*Российская
академия наук*

ISSN 1026—3500

Известия Академии наук

Серия
химическая

2024

5

том 73

стр. 1093—1496

Журнал издается одновременно на русском («Известия Академии наук. Серия химическая») и английском («Russian Chemical Bulletin») языках. Подробную информацию о журнале, содержания номеров журнала в графической форме и аннотации статей, а также годовые предметные и авторские указатели можно получить в Интернете по адресу: <http://www.russchembull.ru/rus/>

The Journal is published in Russian and English.

The International Edition is published under the title «Russian Chemical Bulletin» by Springer:
233 Spring St. New York NY 10013 USA. Tel.: 212 460 1572. Fax: 212 647 1898.

Detailed information concerning the journal contents of issues with graphical and text abstracts as well as annual subject and author indices can be found in the Internet at <http://www.russchembull.ru>

Содержание

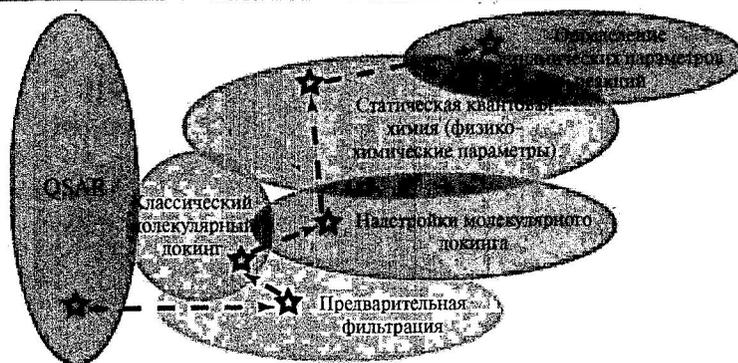
К 90-летию Института органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, xiii

Обзоры

Молекулярное моделирование в синтетической химии: от статистических методов к квантовой химии и практическим приложениям

И. В. Свитанько, Т. С. Пивина

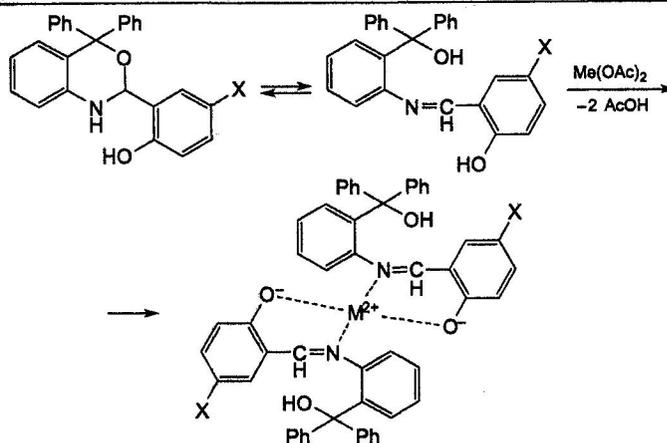


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1093

QSAR — количественная связь структура—свойство.

4*H*-3,1-Бензоксазины и их дигидропроизводные: синтез, реакционная способность и биологическая активность

Е. В. Громачевская, Е. А. Кайгородова,
Л. Д. Конюшкин, А. В. Беспалов



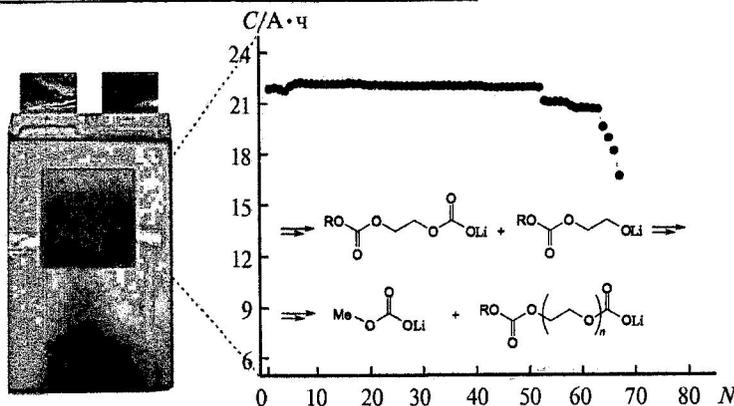
Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1109

M = Cu, Co, Ni; X = H, NO₂

Полные статьи

Химические аспекты деградации литий-ионного аккумулятора на основе слоистого оксида LiNi_{0.6}Mn_{0.2}Co_{0.2}O₂ и графита

Н. С. Каторова, А. С. Галушко,
Ю. В. Бурькина, А. Н. Фахрутдинов,
В. В. Ключев, В. А. Булюкина,
И. Ю. Крамарев, Е. М. Пажетнов,
А. М. Абакумов, В. П. Анаников,
Е. В. Антипов

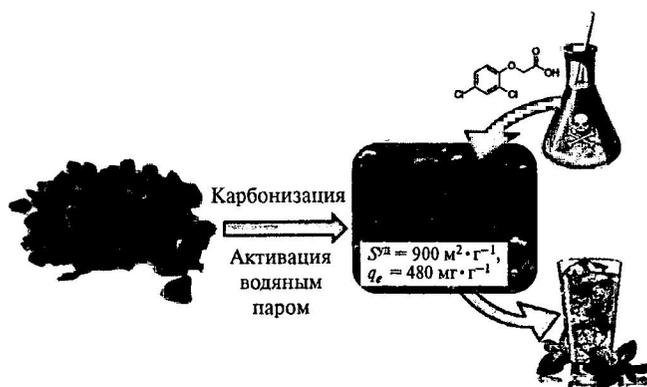


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1136

Реагенты и условия: (MeO)₂CO, MeOC(O)OEt, 1,3-диоксолан-2-он; N — число циклов заряда—разряда.

Активный уголь из скорлупы кедрового ореха для адсорбции 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты из водной среды

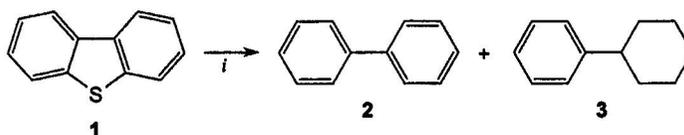
М. Д. Веденяпина, А. К. Ракищев,
А. Ю. Курмышева, С. А. Кулайшин,
Е. А. Райская, О. Б. Бельская



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1149

Криогенное диспергирование молибдена как метод повышения активности массивных катализаторов на его основе

Т. А. Федущак, М. А. Уймин,
В. В. Майков, С. П. Журавков,
В. А. Власов, И. П. Просвирин,
Н. А. Репьев, В. М. Коган



i. Катализатор, растворитель — $\text{C}_{16}\text{H}_{34}$, $P = 3.0\text{--}3.4$ МПа, $300\text{--}340$ °С, 8 ч.

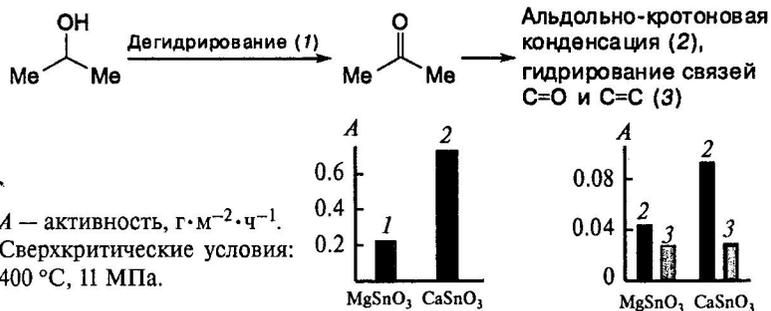
Изучена каталитическая активность дисульфида молибдена, подвергнутого криогенному диспергированию в He, H_2 , N_2 и Ag, в реакции гидродесульфирования дибензотиофена (1) с образованием бифенила (2) и циклогексилбензола (3); $[\text{S}]_{\text{res}}$ — остаточное содержание серы в продуктах реакции.

Катализатор	C (%)		$[\text{S}]_{\text{res}}$, м.д.
	2	3	
Ag-MoS ₂	61.0	35.3	0
H ₂ -MoS ₂	34.2	53.7	0
N ₂ -MoS ₂	71.8	18.2	36
He-MoS ₂	38.0	62.0	80

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1156

Станнаты кальция и магния в каталитической конверсии изопропилового спирта в сверхкритических условиях

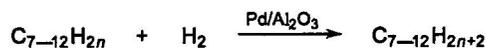
Т. В. Богдан, А. Р. Саварец,
Н. В. Машенко, А. Е. Коклин,
О. П. Ткаченко, В. И. Богдан



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1165

Продукт гидрирования модельной смеси алкилзамещенных соединений бензола $\text{C}_7\text{--}\text{C}_{12}$ — новый жидкий органический носитель водорода

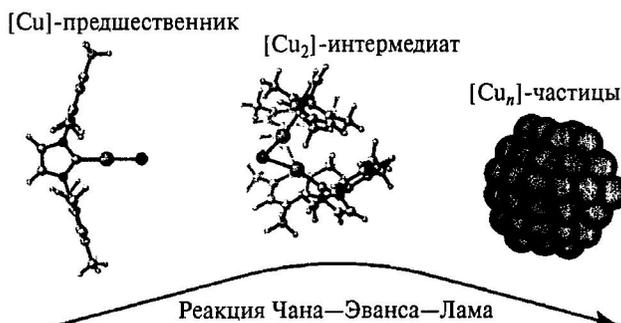
А. Н. Каленчук, Н. Н. Толкачев,
И. И. Лищинер, О. В. Малова,
Л. М. Кустов



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1176

Анализ интермедиатов каталитической системы реакции Чана—Эванса—Лама на основе комплекса *N*-гетероциклического карбена и Cu(I)

А. С. Галушко, В. А. Скуратович,
М. В. Грудова, В. В. Ильюшенкова,
Н. М. Иванова

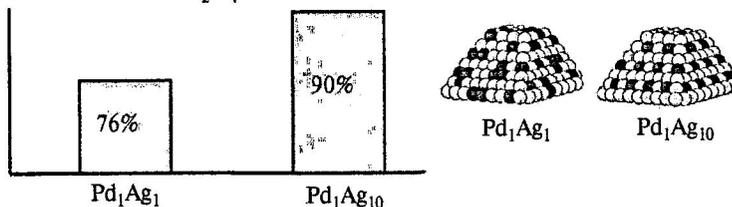


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1182

Роль изолированных атомов палладия в катализаторах PdAg/Al₂O₃ для селективного гидрирования ацетилена

П. В. Марков, Г. Н. Баева,
Н. С. Смирнова, А. Е. Ваулина,
Д. П. Мельников, И. С. Машковский

Селективность по C₂H₄



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1189

Высокоселективное Pd-катализируемое гидроксикарбонилирование стирола

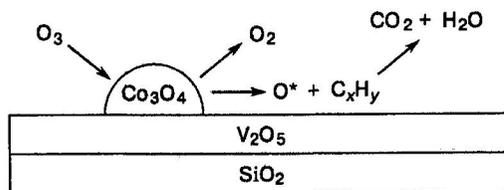
О. Л. Елисеев, Т. Н. Бондаренко,
М. В. Цапкина, А. Л. Лапидус



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1197

Промотированный кобальтом высокоэффективный V₂O₅/SiO₂-катализатор окисления летучих органических соединений озонном

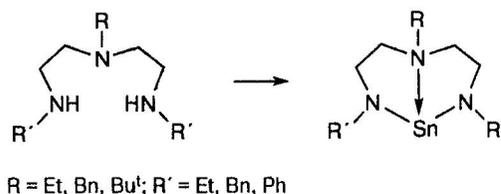
Д. А. Бокарев, С. А. Канаев,
Г. О. Брагина, А. Е. Ваулина,
Г. Н. Баева, А. Ю. Стахеев



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1201

Станилены на основе алкил- и арилзамещенных диэтилентриаминов: синтез, структура и каталитическая активность

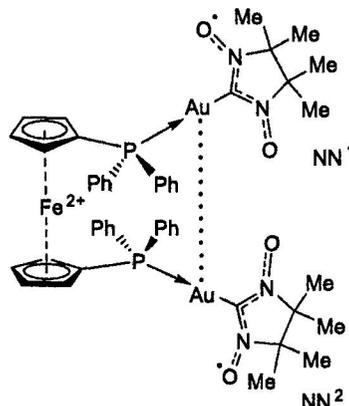
М. У. Агаева, Б. Н. Манкаев,
К. А. Лысенко, М. П. Егоров,
С. С. Карлов



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1208

Синтез, структура и свойства двухъядерного комплекса золотоорганического производного нитронилнитроксила с 1,1'-бис(дифенилфосфино)ферроценом

И. А. Заякин, М. А. Сыроешкин,
П. Г. Шангин, А. А. Корлюков,
А. А. Дмитриев, Н. П. Грицан,
Е. В. Третьяков



$$J/k_B = -22.6 \text{ K (BS-UB3LYP)}, \\ -16.7 \text{ K (CASSCF(6,6)/NEVPT2)};$$

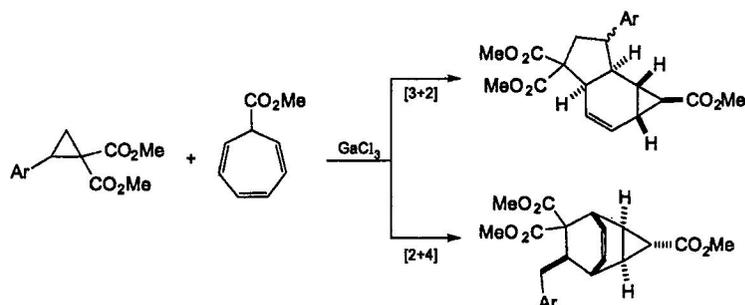
$$\text{Au} \cdots \text{Au}: 3.372 \text{ \AA}, 6.0 \text{ ккал} \cdot \text{моль}^{-1};$$

$$\text{потенциалы полуволн окисления} \\ E^{1/2}(\text{ок.}) = -34 \text{ (NN}^1\text{)}, 232 \text{ (Fc)}, \\ 845 \text{ мВ (NN}^2\text{)}.$$

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1216

Пути превращения 2-арилциклопропан-1,1-дикарбоксилатов с монозамещенными циклогептатриенами под действием GaCl₃

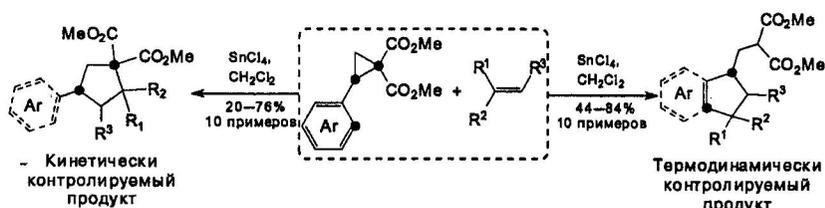
Д. Д. Борисов, А. А. Ершова,
Д. Н. Платонов, Р. А. Новиков,
Ю. В. Томилов



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1229

Конкуренция (3+2)-аннелирования и (3+2)-циклоприсоединения при взаимодействии алкенов с донорно-акцепторными циклопропанами

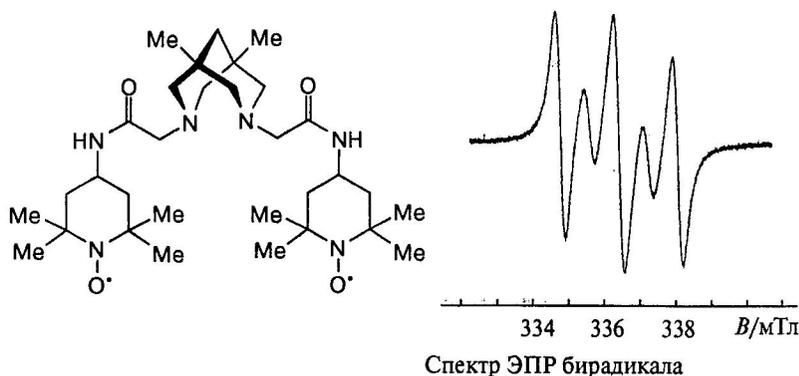
Ю. А. Волкова, М. А. Бойченко,
В. В. Шорохов, С. С. Жохов,
И. А. Андреев, Н. К. Ратманова,
И. В. Трушков, О. А. Иванова



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1237

Синтез спин-меченых биспидинов

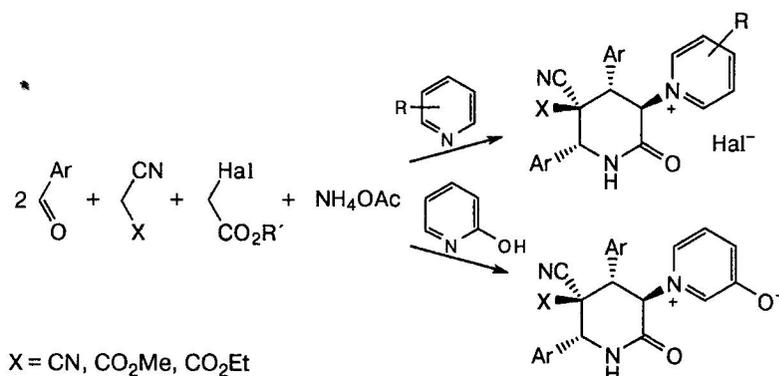
А. М. Закиров, А. В. Медведько,
И. И. Трошин, Е. В. Третьяков,
С. З. Вацадзе



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1253

Однореакторный процесс образования шести связей: псевдошестикомпонентный диастереоселективный синтез пиридинийсодержащих пиперидин-2-онов

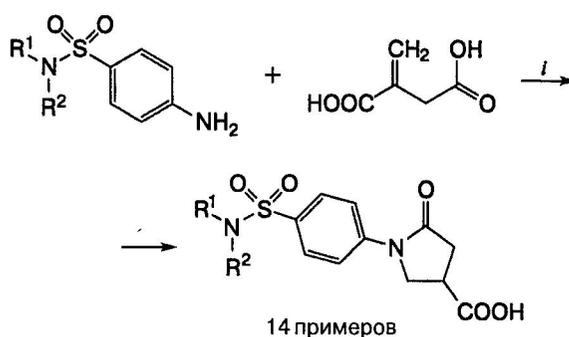
А. Д. Винокуров, Т. М. Илиясов,
К. А. Карпенко, А. Б. Валеев,
А. Н. Фахрутдинов, М. Н. Элинсон,
А. Н. Верещагин



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1261

Синтез 5-оксо-1-[4-(аминсульфонил)фенил]-пирролидин-3-карбоновых кислот

С. А. Серков, Н. В. Сигай,
Н. Н. Костилова, А. П. Тюрин,
Н. Г. Колотыркина, Г. А. Газиева

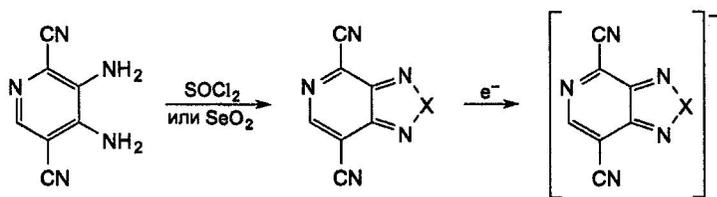


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1273

14 примеров
i. 140—165 °С, 3—6 ч.

Синтез 4,7-дициано[1,2,5]тиа- и [1,2,5]-селенадиазоло[3,4-с]пиридинов и их электрохимическое восстановление до анион-радикалов

Т. Н. Чмовж, Т. А. Кудряшев,
Л. В. Михальченко, О. А. Ракитин

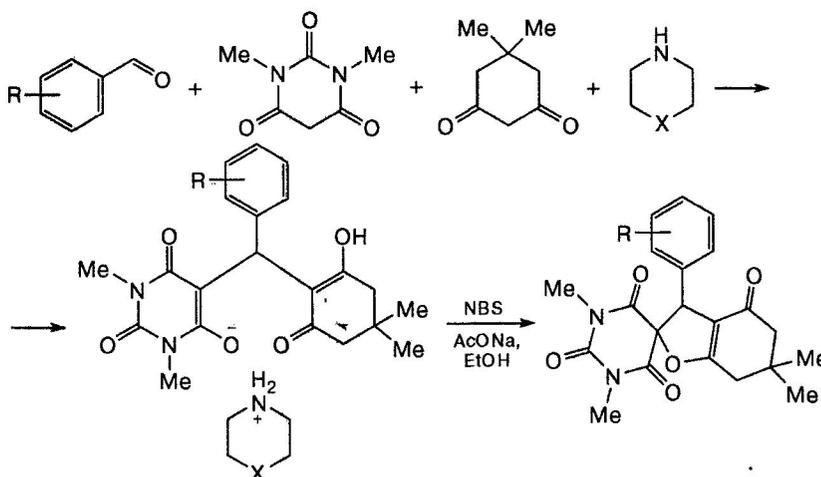


X = S, Se

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1280

Мультикомпонентный синтез новых производных барбитуровой кислоты

М. Н. Элинсон, А. Н. Верешагин,
Ю. Е. Рыжкова, К. А. Карпенко,
Т. М. Илиясов, В. М. Калашникова,
М. П. Егоров

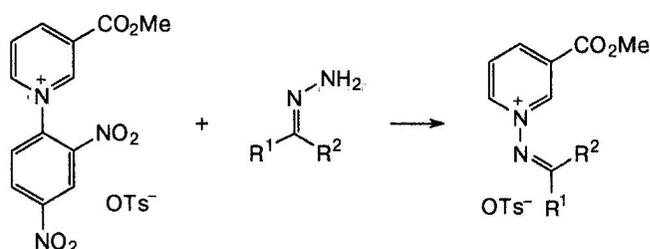


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1286

X = O, CH₂

Синтез N-(иминил)пиридиновых солей из гидразонов по реакции Цинке

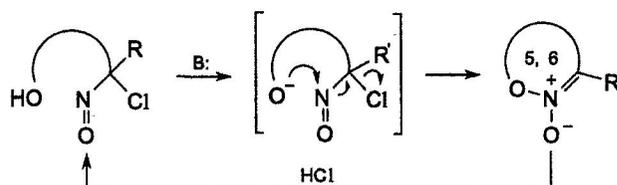
Е. А. Ильин, В. О. Смирнов,
А. Д. Дильман



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1297

Обратимая pH-зависимая циклизация гидроксизамещенных гем-хлорнитрозосоединений в N-оксиды изоксазолинов и 5,6-дигидро-4H-1,2-оксазинов

Р. С. Малыхин, А. Ю. Сухоруков

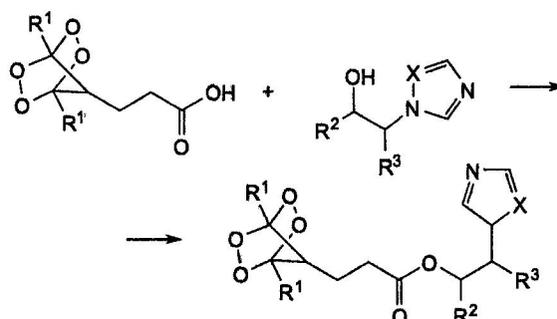


B: = Et₃N, NaOH

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1303

Синтез гибридных соединений, содержащих тетраоксаноновый и триазольный или имидазольный фрагменты, и их фунгицидная активность

П. С. Радулов, Ю. Ю. Белякова,
И. А. Ярёмченко, А. И. Иловайский,
Мань Дао Нгуен, Туен До Тхи,
Туан Чан Тхань, А. О. Терентьев



R¹ = Me, Et; R² = H, Cl, Bu¹; R³ = H, OPhCl; X = N, CH

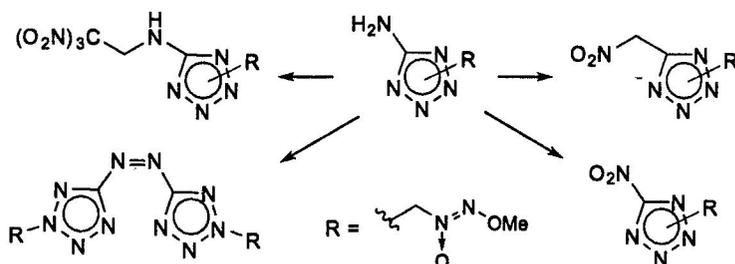
Выходы продуктов 31–57%.

Фунгицидная активность в отношении фитопатогенных грибов.

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1312

Синтез производных 2-метокси-1-тетра-азолилметилдiazен-1-оксидов

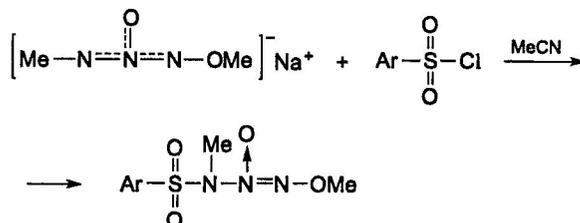
С. В. Никитин, Г. А. Смирнов



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1321

Взаимодействие арилсульфохлоридов с Na-солью 3-метил-1-метокси-1-триазен-2-оксида

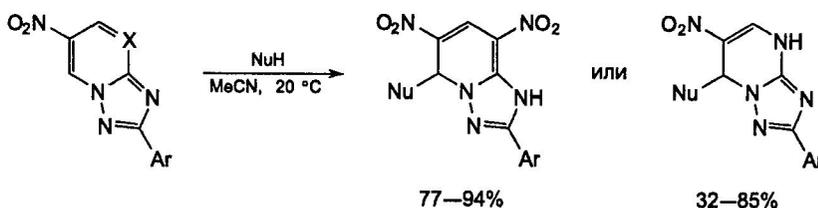
Г. В. Похвиснева, С. Д. Будина,
Г. А. Смирнов



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1328

Нитросодержащие 2-арил[1,2,4]триазоло-[1,5-а]зины в реакциях с С-нуклеофилами

М. А. Бастраков, А. А. Кручинин,
С. А. Колядина, А. М. Старосотников

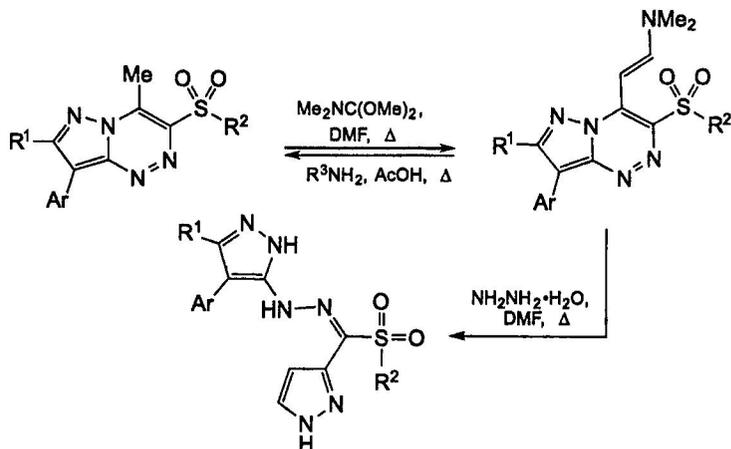


NuH: полифенолы, индолы, 1,3-дикарбонильные соединения

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1334

Синтез N,N-диметиламинометиленовых производных 3-метил(тозил)пиразоло[5,1-c]-[1,2,4]триазинов и их нуклеофил-индуцированные трансформации

И. В. Леденева, П. А. Картавец,
Н. В. Столповская, Х. С. Шихалиев

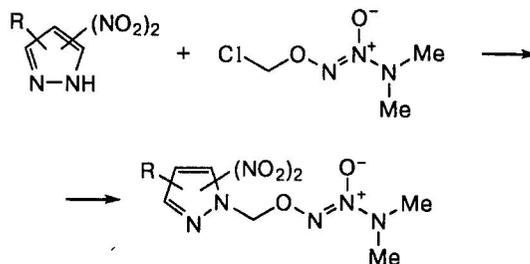


$R^1 = \text{H, Me, CH}_2\text{OMe}; R^2 = \text{Me, 4-MeC}_6\text{H}_4; R^3 = \text{Alk, Ar}$

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1342

O-Динитропиразолилметилсодержащие diazenий-1,2-диолаты: синтез и свойства

Г. А. Смирнов, И. А. Вацадзе,
А. М. Герасимов, Т. К. Шкинева,
К. Ю. Супоницкий, А. Н. Пивкина,
И. Л. Далингер

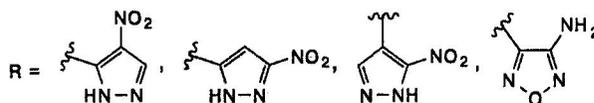
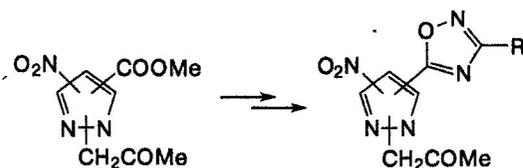


$R = \text{H, Me, NH}_2$

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1352

***N*-Ацетонилнитропиразолкарбоновые кислоты в селективном синтезе *N*-ацетонильных производных 3-*R*-5-(нитропиразолил)-1,2,4-оксадиазолов**

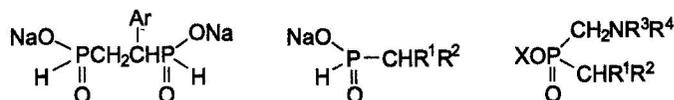
Т. Э. Хоранян, П. К. Гущина,
К. Ю. Супоницкий, И. Л. Далингер



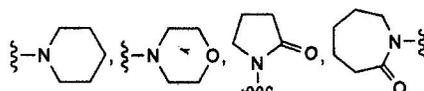
Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1362

Синтез функционализированных фосфорных аналогов β-фенилаланина

Ю. Н. Бубнов, А. А. Прищенко,
М. В. Ливанцов, О. П. Новикова,
Л. И. Ливанцова, С. В. Баранин



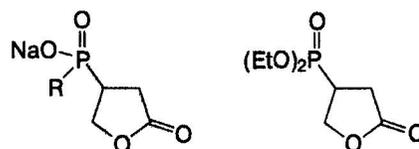
Ar = Ph, 4-MeOC₆H₄; R¹ = H, COOX; X = H, Na;
R² = CH₂Ph, CH(Ph)CH₂CH₂Ph;
NR³R⁴ = NMe₂, N(Me)Ac, N(COOEt)CH₂COOMe,



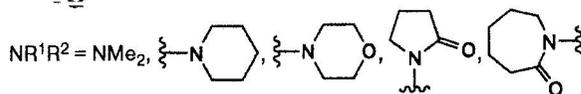
Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1374

Синтез функционализированных фосфорзамещенных производных γ-бутиролактона

Ю. Н. Бубнов, А. А. Прищенко,
М. В. Ливанцов, О. П. Новикова,
Л. И. Ливанцова, С. В. Баранин



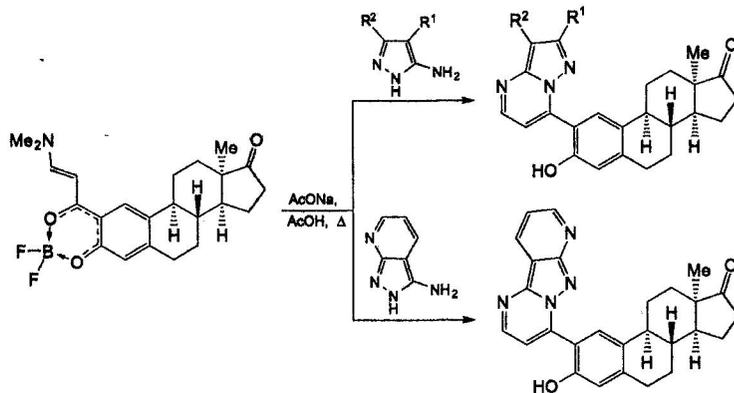
R = H, CH₂CH₂C(O)ONa, CH₂NR¹R²;



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1386

Синтез (13α)-эстронов, содержащих пирразоло[1,5-*a*]пиримидиновые фрагменты в боковой цепи кольца А

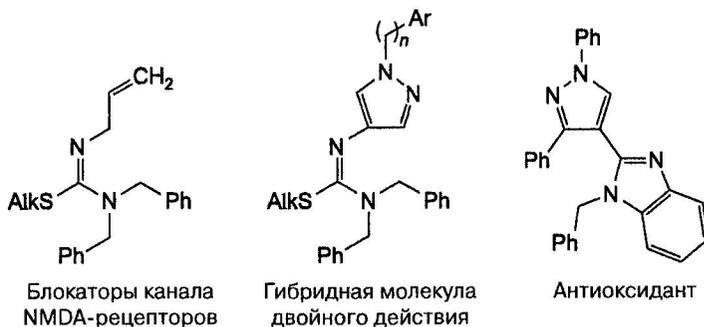
А. А. Сухацова, М. А. Президент,
А. Н. Фахрутдинов, И. В. Заварзин



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1394

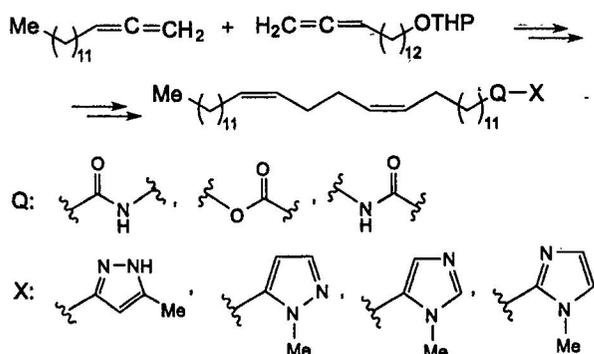
Новые 1,1-дибензил-3-(1-бензил-1*H*-пиразол-4-ил)-2-метилизотиомочевин: синтез и изучение антиоксидантной активности

А. Н. Прошин, Т. П. Трофимова,
А. А. Глоба, Е. С. Дубровская,
О. Н. Зефирова, Н. А. Зефиров,
В. А. Тафеенко, Т. Я. Дутова,
Б. И. Уграк, И. В. Серков



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1399

Синтез перспективных противоопухолевых агентов — *N*-гетероциклических аналогов природного мурикаденина

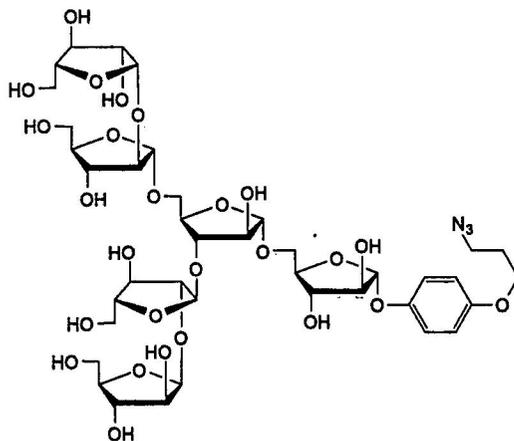


Р. А. Туктарова, Л. У. Джемилева,
У. М. Джемилев, В. А. Дьяконов

THP — 2-тетрагидропиранил

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1408

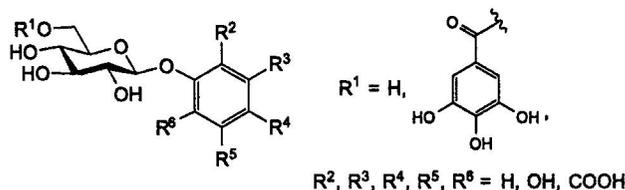
Синтез гексаарабинофуранозида, содержащего 4-(3-азидопропокси)фенильный агликон, родственного концевому участку полисахаридов микобактерий



П. И. Аброна, Н. Н. Малышева,
А. И. Зинин, Н. Г. Колотыркина,
Л. О. Кононов

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1417

Синтез β-глюкозидов, содержащих остатки галловой кислоты

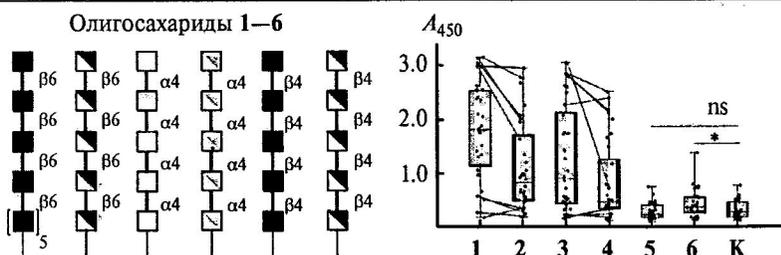


Д. В. Яшунский, А. М. Егоров,
Н. Э. Нифантьев

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1426

Исследование репертуара антител к олигосахаридным фрагментам полиглюкозаминов и галактозаминогликанов в сыворотках крови здоровых доноров

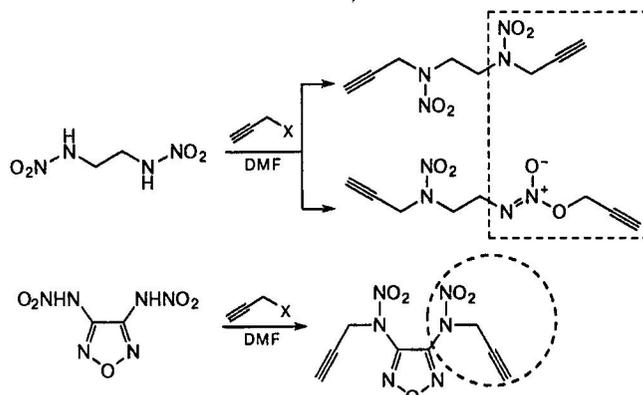
М. Л. Генинг, А. В. Полянская,
А. Н. Кузнецов, Ю. Е. Цветков,
О. Н. Юдина, Д. В. Яшунский,
П. В. Царапаев, Н. Е. Кушлинский,
В. Б. Крылов, Н. Э. Нифантьев



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1434

Краткие сообщения

N-Пропаргилнитрамы: синтез и строение

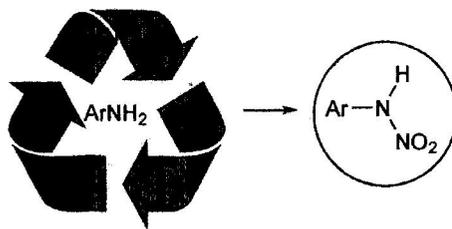


П. С. Грибов, К. Ю. Супоницкий,
А. Б. Шереметев

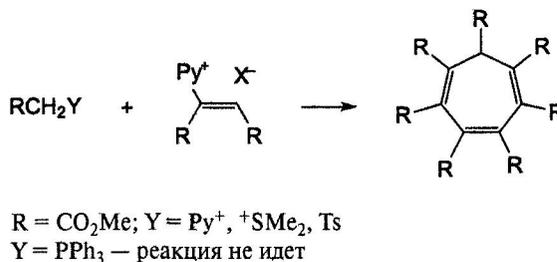
Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1443

Эффективный синтез арилнитраминов

Д. Л. Липилин, А. Б. Шереметев

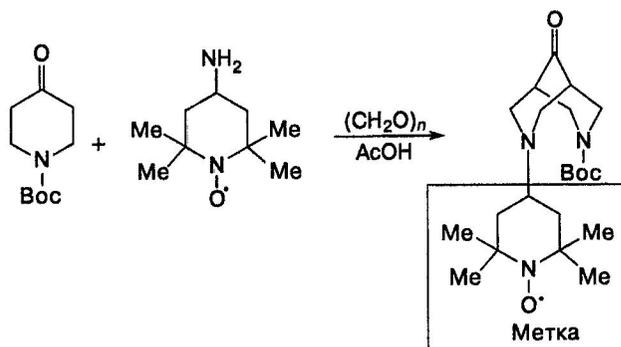


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1450

Исследование реакций СН-кислот с генерируемым *in situ* N-[1,2-бис(метоксикарбонил)-винил]пиридинием в синтезе 1,2,3,4,5,6,7-гепта(метоксикарбонил)циклогептатриенаА. Ю. Белый, А. Д. Соколова,
Р. Ф. Саликов, Д. Н. Платонов,
Ю. В. Томилов

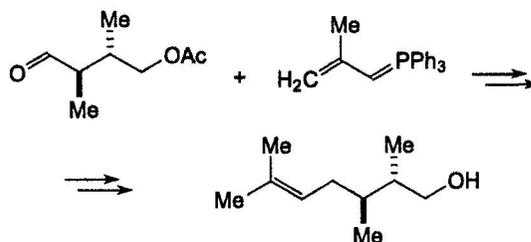
Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1455

Первый пример использования 4-амино-2,2,6,6-тетраметилпиперидин-1-оксида в реакции Манниха для получения меченых радикалами биспидинов

А. В. Медведько, М. О. Ермаков,
С. З. Вацадзе

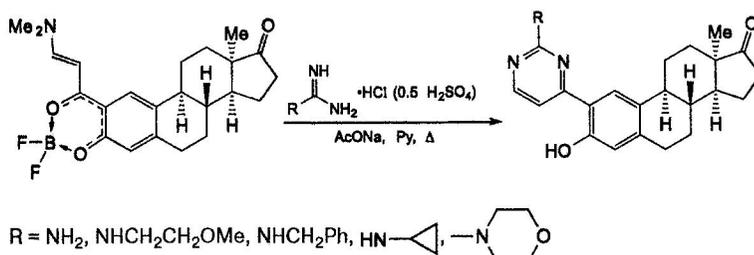
Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1460

Простой синтез ацетата эритро-2,3,6-триметилгепта-4,6-диен-1-ола — предшественника лазидола

А. А. Васильев, Г. М. Жданкина,
С. Г. Злотин

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1465

Метод введения аминопиримидинильных заместителей в боковую цепь кольца А (13α)-эстронов

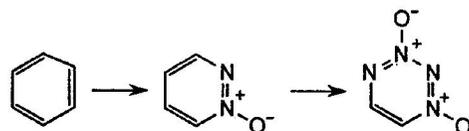
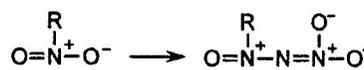
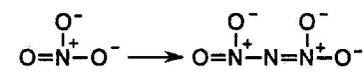
А. А. Суханова, М. А. Президент,
А. Н. Фахрутдинов, И. В. Заварзин

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1469

Информация

Создание новых азот-кислородных систем
в Лаборатории химии нитросоединений
Института органической химии имени
Н. Д. Зелинского Российской академии наук

М. С. Кленов, А. М. Чураков,
А. А. Воронин, Д. Б. Виноградов,
В. А. Тартаковский



Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1473

Памяти Леонида Исааковича Беленького

Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1495