

НИОХ СО РАН

Итоги 2020 года



Добро пожаловать!

Новосибирский институт органической химии (НИОХ) был создан 27 июня 1958 года. Директором-организатором института был выдающийся химик-органик Николай Николаевич Ворожцов-мл.

2020 год НИОХ СО РАН в цифрах

На **30** декабря **2020** года
в **НИОХ СО РАН** работает
402 человека,
в числе которых
152 научных работника,
31 доктор наук
и **101** кандидат наук,
53,2% до 39 лет

Подготовка кадров

25 аспирантов НИОХ СО РАН,
12 аспирантов НГУ,
1 аспирант ИХБФМ СО РАН,
46 студентов
8 кандидатских диссертаций

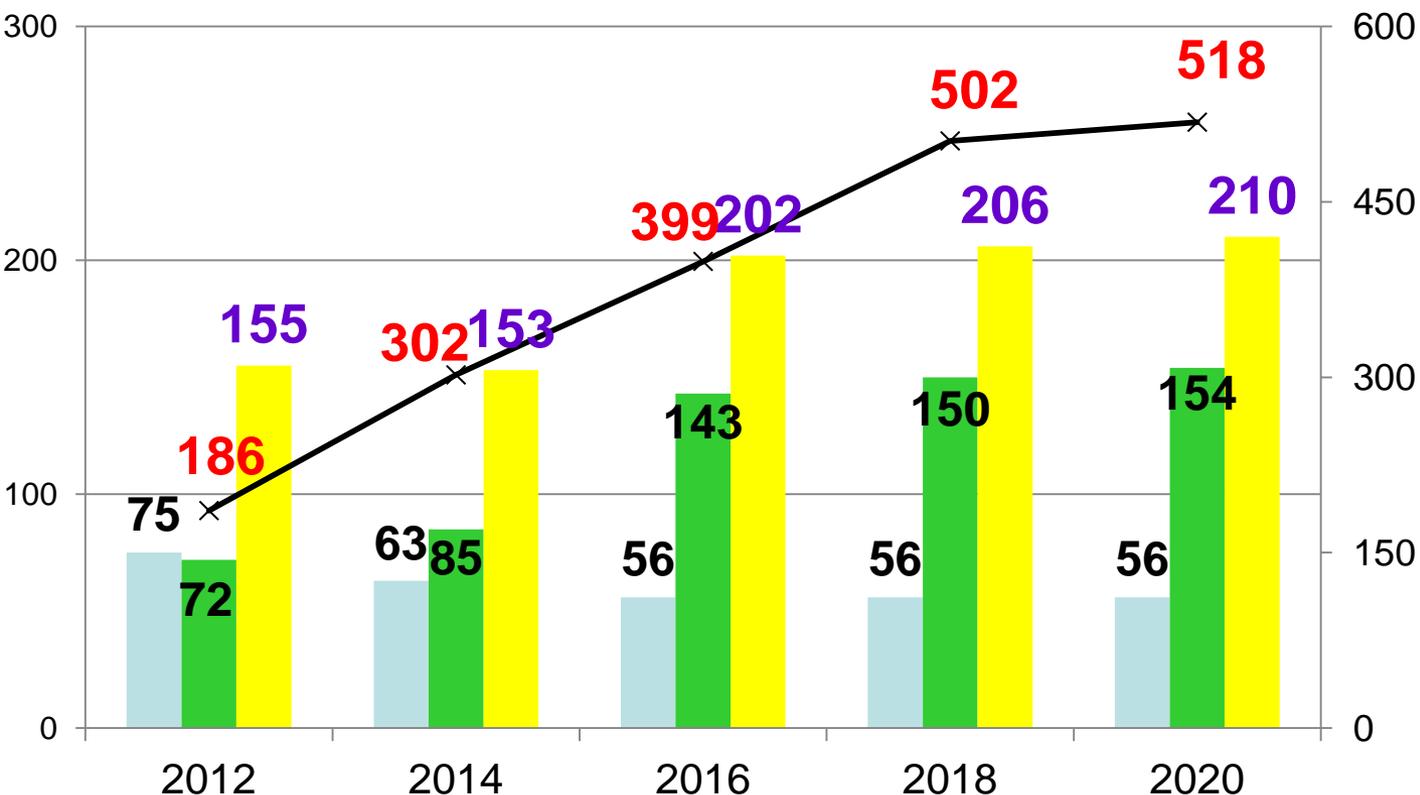
Структура НИР

8 базовых проектов,
3 новых лаборатории,
1 мегагрант
9 грантов РФФ
27 грантов РФФИ
1 грант МОН
«Медицинская химия»

Публикации

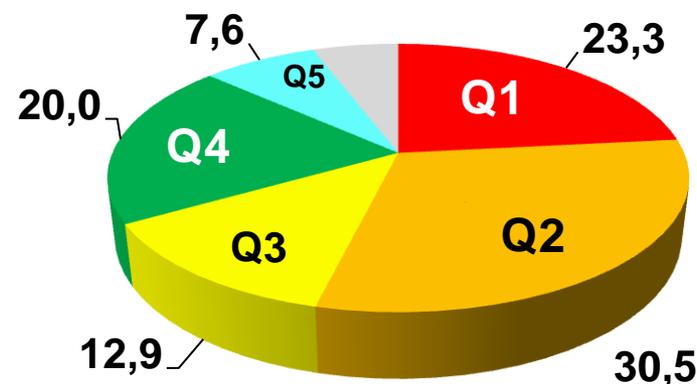
1 монография,
1 глава в монографии,
210 статей (**199** WoS)
12 патентов РФ

Рост количества и качества публикаций НИОХ СО РАН



- Статьи в российских журналах
- Статьи в международных журналах
- Всего статей в научных журналах
- ✕ Суммарный IF статей и обзоров в научных журналах

Средний IF статьи 2.46



Распределение по квартилям (2020)

НИР Института 2020 г., млн. рублей

Государственное задание **231,48**

Грант Правительства РФ (мегагрант) **28,0**

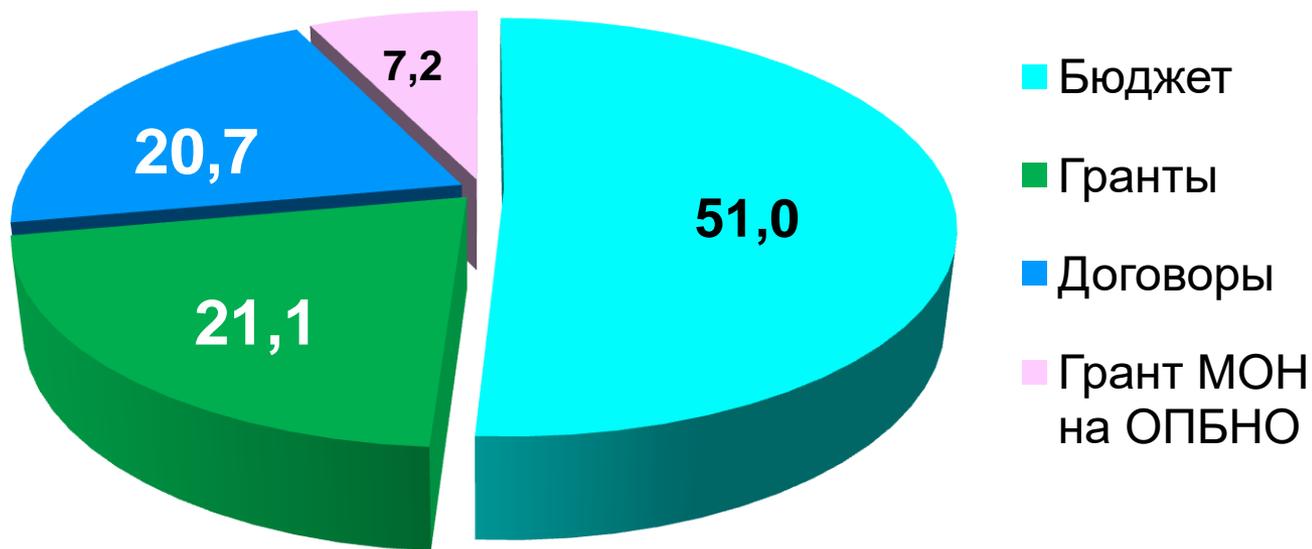
Гранты РНФ **39,5**

Гранты РФФИ **28,3**

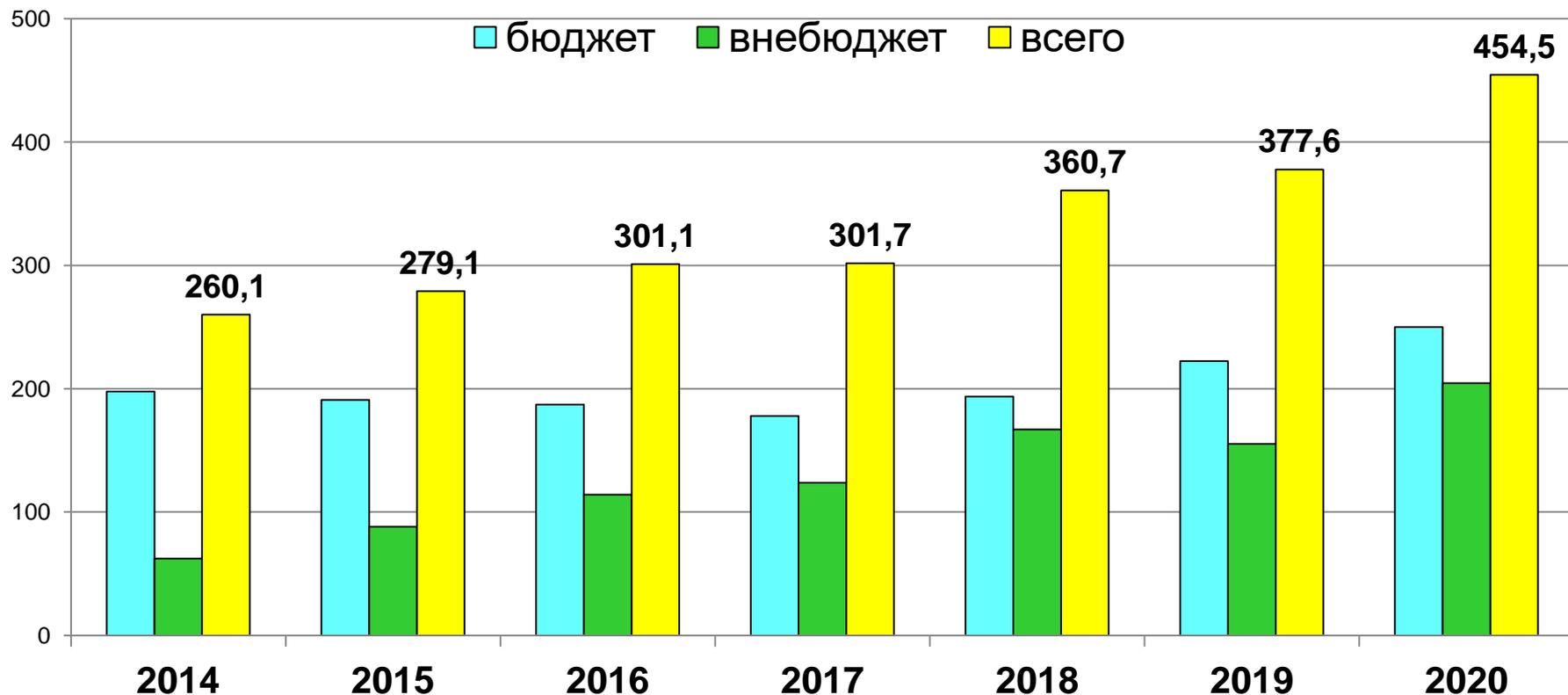
Крупный научный проект «Медицинская химия» **10,0**

Договоры НИР **82,76**

Грант МОН на обновление приборной базы **36,9**



Поступления денежных средств в млн. руб.



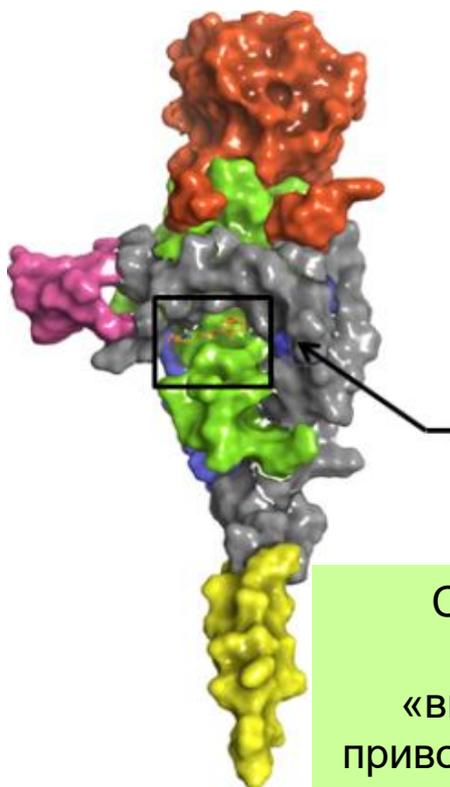
	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020
бюджет	197,8	191,0	187,1	177,9	193,6	222,4	250,0
внебюджет	62,3	88,1	114,0	123,8	167,1	155,2	204,5
всего	260,1	279,1	301,1	301,7	360,7	377,6	454,5
доля в/б	0,239	0,315	0,379	0,410	0,463	0,411	0,450

Направления научной деятельности НИОХ СО РАН

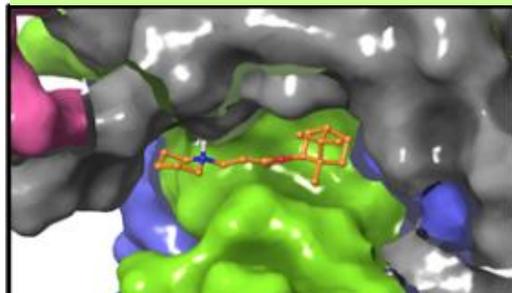
- изучение механизмов реакций органических соединений, строения и свойства соединений и активных промежуточных частиц, включая квантово-химические методы расчета структуры и свойств веществ;
- создание новых и импортозамещающих отечественных лекарственных средств для профилактики и лечения социально-значимых заболеваний,
- разработки технологии синтеза новых функциональных материалов, в том числе светочувствительных и фторсодержащих,
- разработка средств стимуляции роста и защиты растений от инфекций и на основе природных соединений,
- разработка аналитических и инструментальных методик установления структуры и строения органических соединений, контроля объектов окружающей среды.
- разработка химических процессов тонкого органического синтеза и переработки растительного сырья,

Ингибиторы филовирусов на основе бициклических монотерпеноидов

НИОХ СО РАН, ГНЦ ВБ «Вектор», НГУ



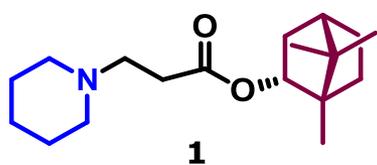
Молекулярный докинг *in silico*:
вероятной мишенью соединений
является гликопротеин вируса



Сайт-направленный мутагенез:
M548A, Y517A и D522A
«выключение» сайтов связывания
приводит к снижению активности агента

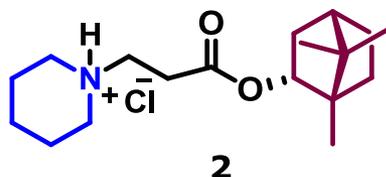
Соединения-лидеры

Эффективная концентрация $\sim 10^{-6}$ моль/л



MARV

IC₅₀ 3.7 мкМ
SI 118



EBOV

IC₅₀ 9.1 мкМ

В НИОХ СО РАН получена серия производных камфоры и борнеола, среди которых соединения **1** и **2** проявили вирус ингибирующую активность в отношении псевдовиральной системы, а также натуральных вирусов Эбола и Марбург.

Моделирование *in silico* предсказывает молекулярный докинг соединений **1** и **2** в активный сайт связывания известных ингибиторов.

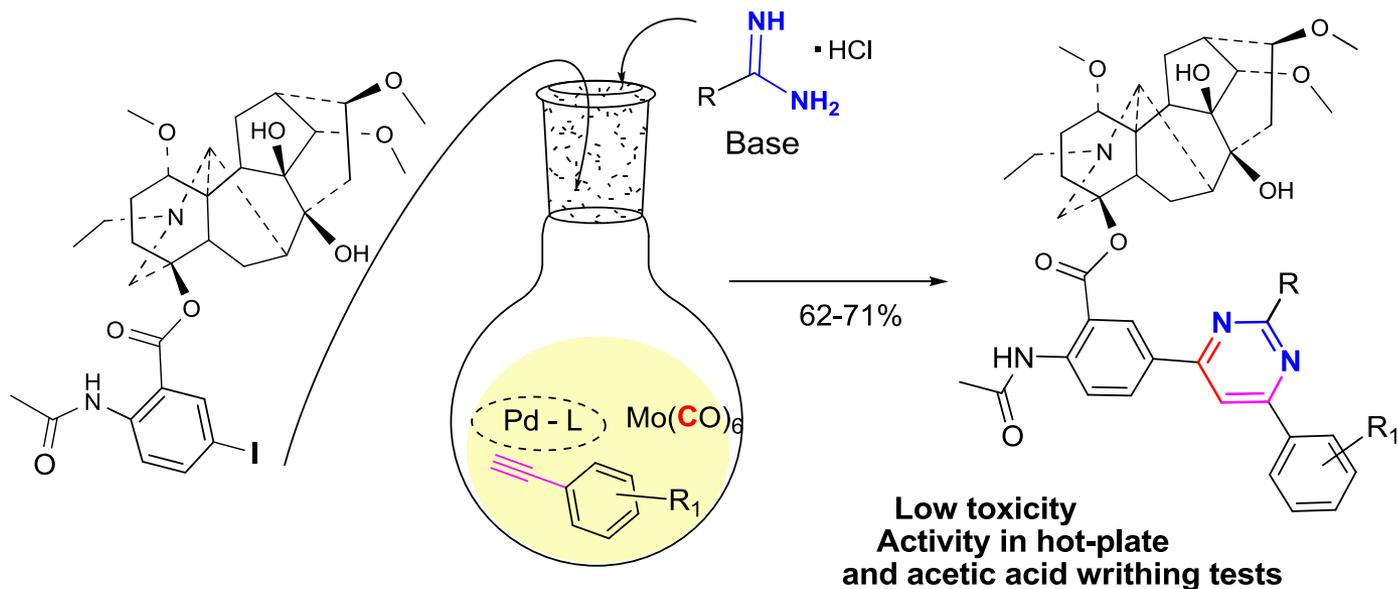
Сайт-направленный мутагенез – замена аминокислот метионина-548, тирозина-517, аспарагиновой кислоты-522 на аланин подтверждает гипотезу о месте и характере связывания новых ингибиторов

A.S. Sokolova, O.I. Yarovaya, A.V. Zybkina, E.D. Mordvinova, N.S. Shcherbakova, A.V. Zaykovskaya, D.S. Baev, T.G. Tolstikova, D.N. Shcherbakov, O.V.

Pyankov, R.A. Maksyutov, N.F. Salakhutdinov.
European Journal of Medicinal Chemistry, 2020,
DOI10.1016/j.ejmech.2020.112726 IF=5.587

Анальгетические агенты со структурными фрагментами лаппаконитина и пиримидина

НИИ молекулярной биологии и биофизики,
ФИЦ фундаментальной и трансляционной медицины

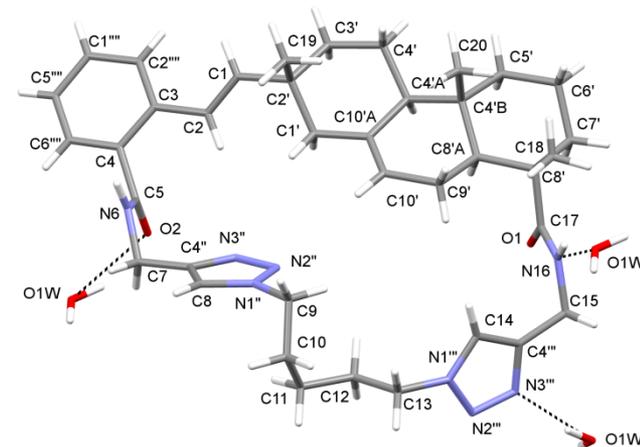
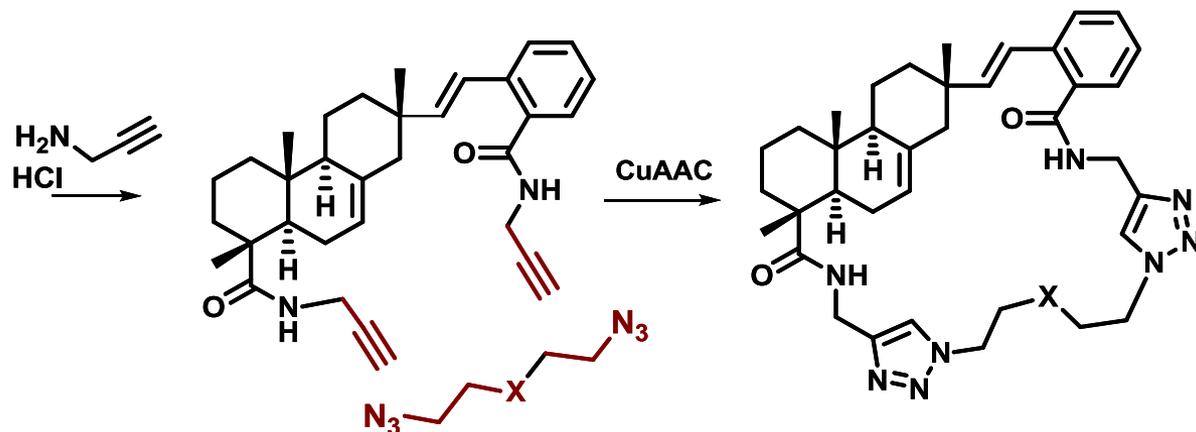
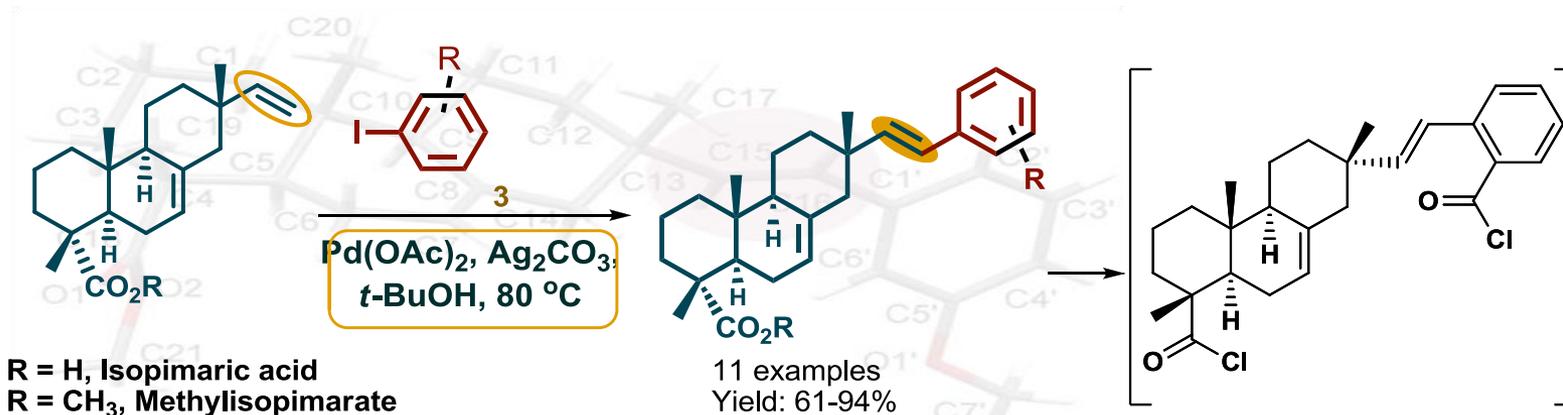


Предложены эффективные пути синтеза гибридных молекул, содержащих фрагменты дитерпенового алкалоида лаппаконитина и замещенных пиримидинов. Фармакологический скрининг лаппаконитин-пиримидиновых гибридов *in vivo* выявил, что полученные соединения проявляют значительную анальгетическую активность в тестах экспериментальной боли. Получены данные по взаимосвязи структура-активность.

K. P. Cheremnykh, V.A. Savelyev, S.A. Borisov, I.D. Ivanov, D.S. Baev, T.G. Tolstikova, V.A. Vavilin, E.E. Shults, *Molecules*. 2020. V. 25. N 23. article 5578, DOI: 10.3390/molecules25235578 IF=3.26



Макроциклические дитерпеноиды пимаранового типа из изопимаровой кислоты



1. Chemical Monthly, 2020, DOI: 10.1007/s00706-020-02713-3.

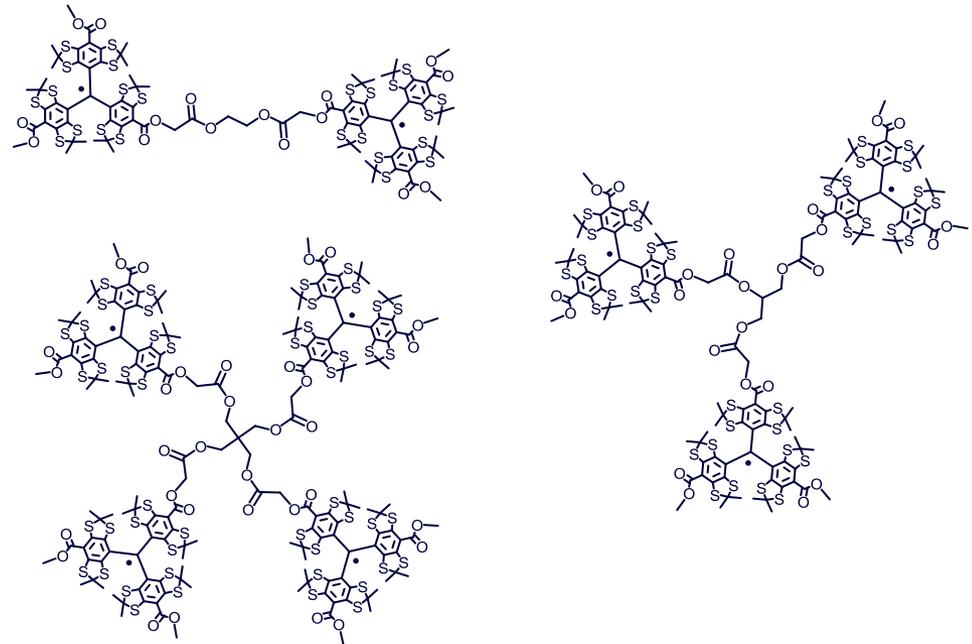
2. MA. Gromova, Y V. Kharitonov, T V. Rybalova, EE. Shults, Click synthesis of triazole-linked polyazamacrocycles through selective isopimaric acid transformations // Macroheterocycles. 2020 (принята в печать)

Импульсный ЭПР с использованием мультиквантового фильтра в определении количества спинов в мультиспиновых системах

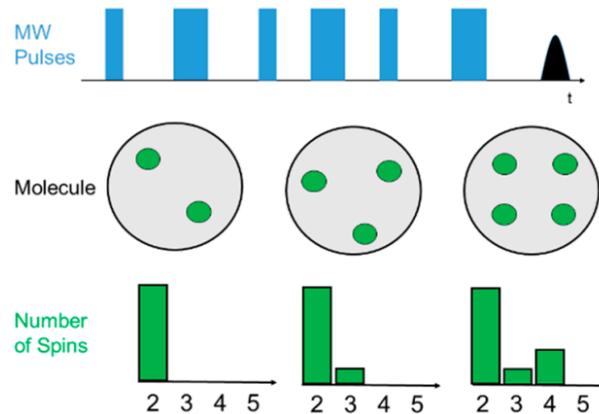
НИОХ СО РАН, Goethe University (Frankfurt am Main, Germany, ФРГ)

С использованием серии модельных мультиспиновых систем, построенных на основе стабильных радикалов тритильного типа, и импульсной спектроскопии ЭПР (X-band, 9GHz) впервые показана возможность регистрации агрегатов связанных спинов – от двух до четырех.

Разработан подход к исследованию процессов комплексообразования с участием спин-меченых пептидных молекул в их нативном состоянии.



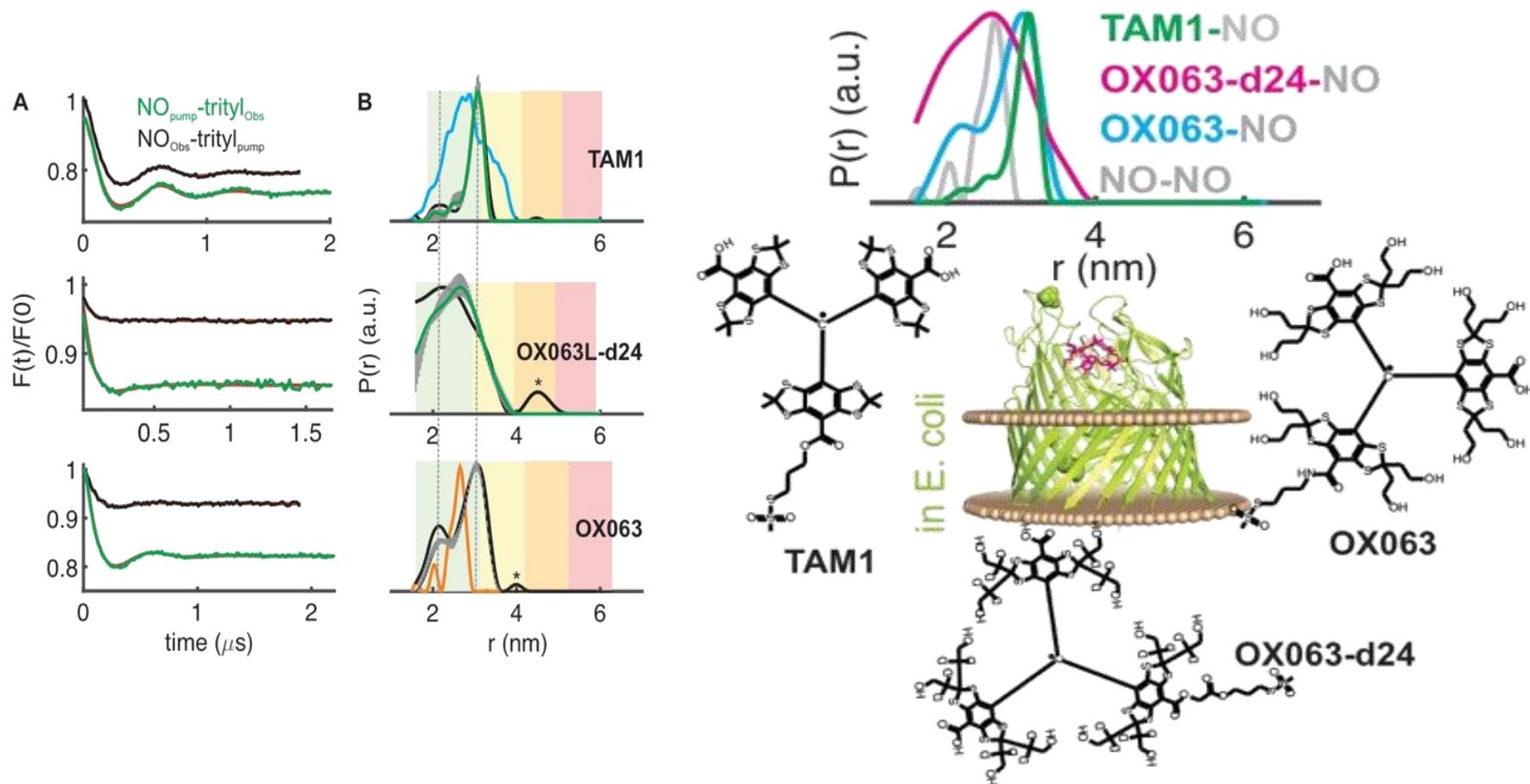
Модельные мультиспиновые системы



Оценка количества спинов в мультиспиновых системах

Измерение расстояний в мембранах в клетках *E. coli* с применением спиновых меток на основе Финского и OX063 тритильных радикалов

НИОХ СО РАН, Goethe University (Frankfurt am Main, Germany, ФРГ)



B. Joseph, S. Ketter, Aathira Gopinath, Olga Rogozhnikova, Dmitrii Trukhin, Victor M. Tormyshev, Elena G. Bagryanskaya, *Chemistry - A European Journal*, 2020, DOI:10.1002/chem.202004606 IF=4.857

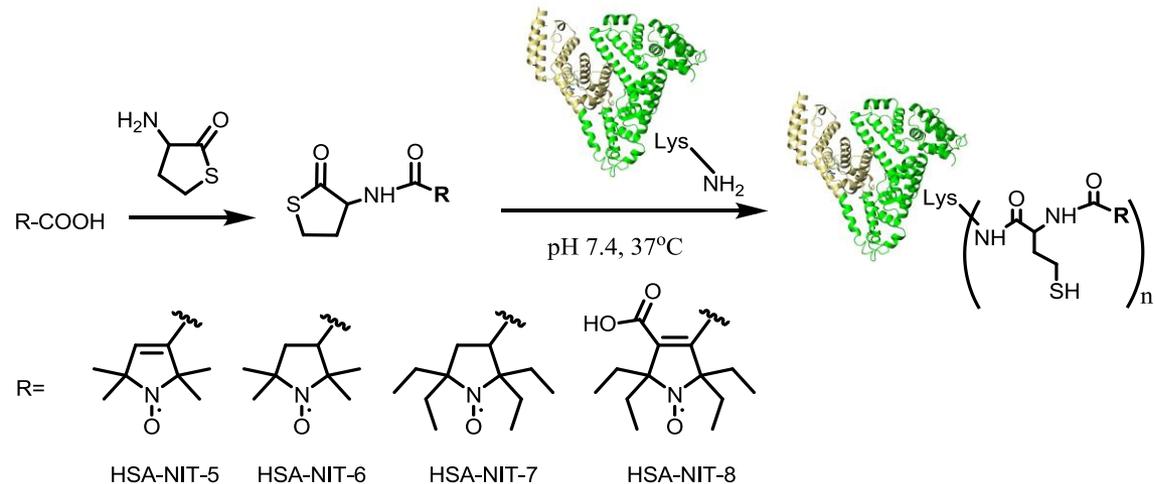
Прототип нетоксичных контраст-реагентов для МРТ

НИОХ СО РАН, ИХБФМ СО РАН, МТЦ СО РАН, Институт биологической кибернетики (ФРГ), Университет Алабамы

С целью разработки контрастных реагентов для МРТ, не содержащих токсичных соединений переходных металлов, предложен способ построения полирадикальных агентов на основе естественного компонента крови - человеческого сывороточного альбумина (ЧСА).



Ацилированием тиолактона гомоцистеина карбоновыми кислотами – производными нитроксильных радикалов получены новые спиновые метки, которые селективно вводили в ЧСА по остаткам лизина.



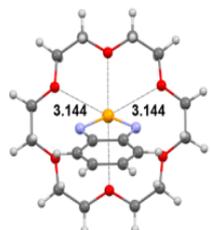
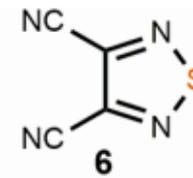
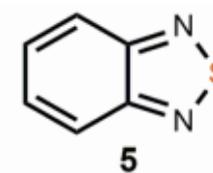
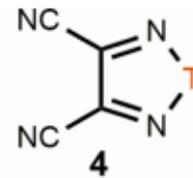
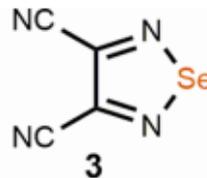
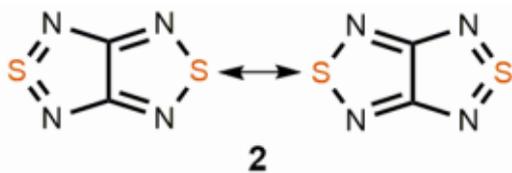
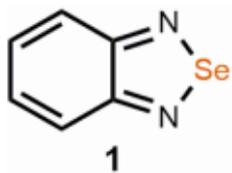
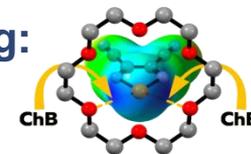
При финансовой поддержке РФФ 19-13-00235, РФФИ 18-53-76003, Мегагранта 14.W03.31.0034

HSA-NIT-R	t°C	Остатков радикала на 1 HSA, n	r ₁ , mM ⁻¹ s ⁻¹ (продольная)	r ₂ , mM ⁻¹ s ⁻¹ (поперечная)	r ₂ /r ₁
HSA-NIT-1	25	4.8	2.0	25.0	12.6
HSA-NIT-2	25	3.9	2.05	21.4	10.5
HSA-NIT-2	37	3.9	1.68	17.4	10.4
HSA-NIT-3	25	3.9	2.08	29.0	13.9
HSA-NIT-3	37	3.9	1.45	20.7	14.3
HSA-NIT-4	25	2.4	0.86	11.8	13.7

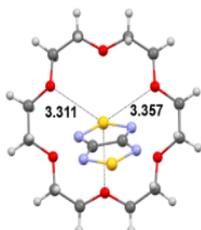
S. Dobrynin, S. Kutseikin, D. Morozov, O. Krumkacheva, A. Spitsyna, Yu. Gatilov, V. Silnikov, G. Angelovski, M.K. Bowman, I. Kirilyuk, A. Chubarov, *Molecules* 2020, 25 (7), 1709. DOI: 10.3390/molecules25071709 IF=3.26

Lewis Ambiphilicity of 1,2,5-Chalcogenadiazoles for Crystal Engineering: Complexes with Crown Ethers

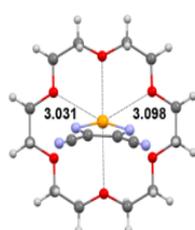
НИОХ СО РАН, University of Bremen, ИХКГ СО РАН



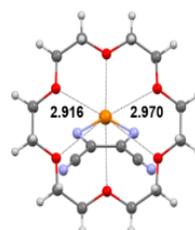
[18-c-6][1]



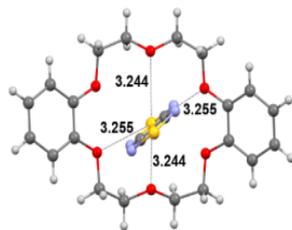
[18-c-6][2]



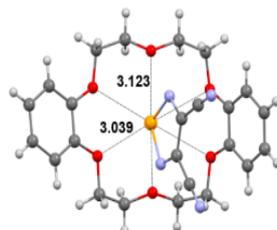
[18-c-6][3]



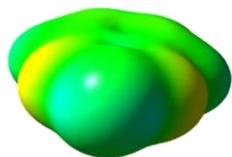
[18-c-6][4]



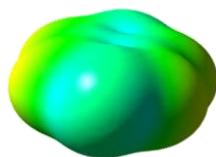
[db-18-c-6][2]



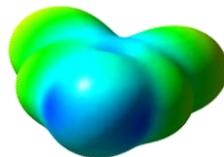
[db-18-c-6][3]



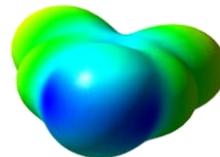
1 (27.1)



2 (24.0)



3 (43.5)



4 (51.7)

Синтезированы и структурно охарактеризованы комплексы халькогенадiazолов 1-4 с 18-краун-6 и дибензо-18-краун-6 полиэфирами. Обнаружена способность халькогенадiazолов образовывать посредством халькогеновой связи комплексы не только с анионами, но и с нейтральными основаниями на примере краун-эфиров. Показано, что открытая ранее в ЛГетС способность 1,2,5-халькогенадiazолов (халькоген = S, Se, Te) образовывать посредством т.н. **халькогеновой связи** (chalcogen bonding – ChB) комплексы с анионами, распространяется и на нейтральные основания.

Дизайн высокоспиновых оксовердазил-нитронилнитроксильных бирадикалов

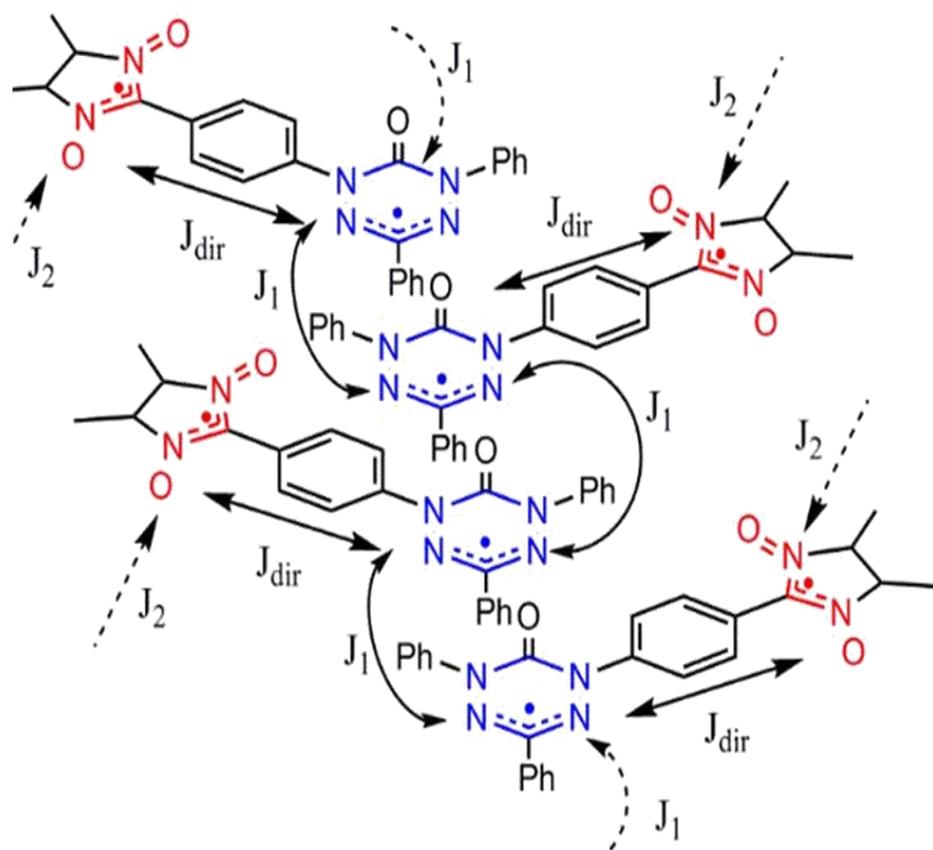
ННОХ СО РАН, ИХКГ СО РАН, МТЦ СО РАН, НГУ, ТПУ

Разработан дизайн и осуществлен синтез стабильных бирадикалов с оксовердазильным и нитронилнитроксильным носителями спинов. В зависимости от строения в бирадикалах реализуются сильные внутримолекулярные обменные взаимодействия антиферромагнитного или ферромагнитного характера.

Знак обменного взаимодействия определяется как мостиковым фрагментом, так и типом оксовердазильного блока.

При кристаллизации триплетные бирадикалы образуют уникальные одномерные обменно-связанные ферромагнитные цепочки спинов $S = 1$.

При финансовой поддержке РФФ

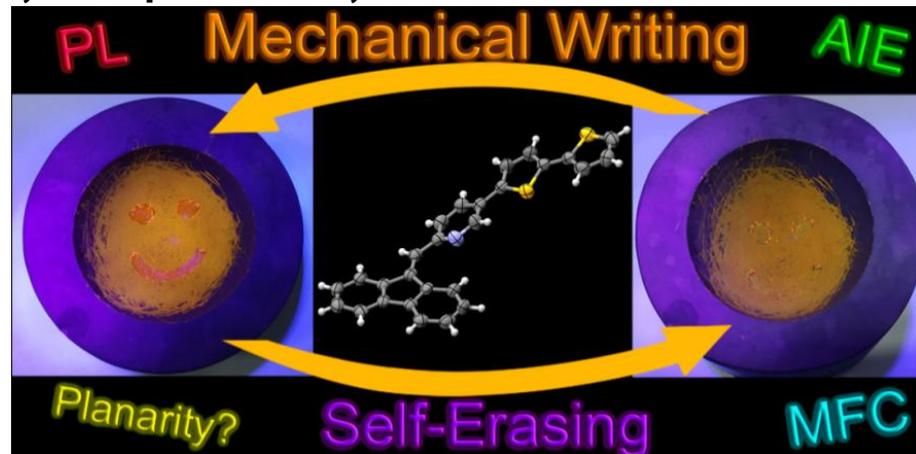


E. V. Tretyakov, S. I. Zhivetyeva, P. V. Petunin, D. E. Gorbunov, N. P. Gritsan, I. Yu. Bagryanskaya, A. S. Bogomyakov, P. S. Postnikov, M. S. Kazantsev, M. E. Trusova, I. K. Shundrina, E. V. Zaytseva, D. A. Parkhomenko, E. G. Bagryanskaya, V. I. Ovcharenko. Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 20704–20710. DOI: 10.1002/anie.202010041 IF=12.96

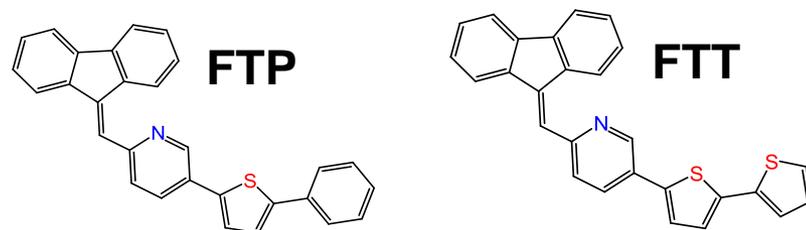
Новые функциональные блоки для люминесцентных материалов, чувствительных к механическим воздействиям

НИОХ СО РАН, МТЦ СО РАН, НГУ

Получены 2-((9H-флуорен-9-илиден)метил)-5-(5-фенилтиофен-2-ил)пиридин (FTP) и 2-((9H-флуорен-9-илиден)метил)-5-([2,2'-битиофен]-5-ил)пиридин (FTT), которые в твердом состоянии демонстрируют квантовый выход фотolumинесценции 33% (FTP) и 13% (FTT). Материал FTT демонстрирует редкий эффект - обратимый механофлуорохромизм: спектр излучения сдвигается в красную область после механического воздействия и восстанавливается в течение нескольких часов. При механическом воздействии происходит обратимая планаризация молекул FTT, что приводит к изменению цвета излучения материала. Данные материалы перспективны для использования в механической печати, нанесения временных флуоресцентных изображений и обратимых сенсоров.



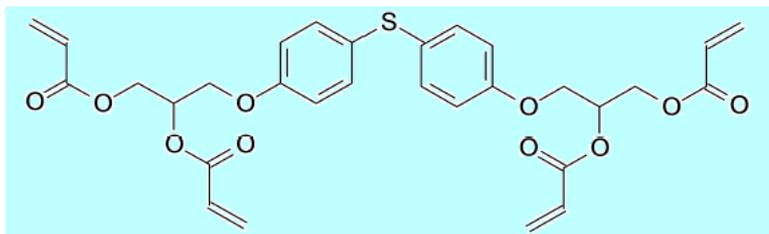
Изменение флуоресцентного изображения, полученного механически на поверхности агатовой ступки с порошком вещества FTT, время между изображениями 24ч



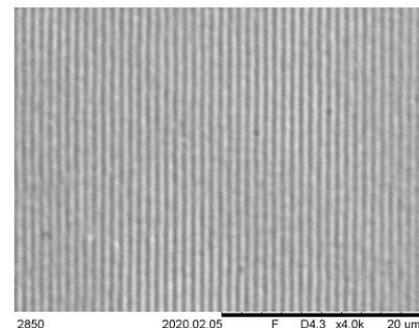
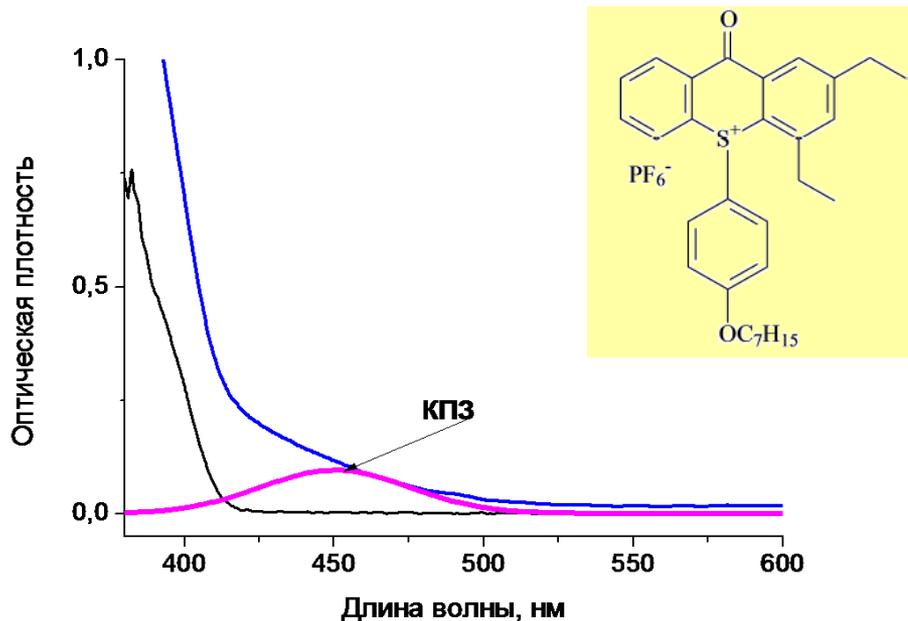
При финансовой поддержке РФФ

Комплекс с переносом заряда между компонентами фотополимерного материала как внутренний sensibilizator спектральной фоточувствительности

НИОХ СО РАН, ИАиЭ СО РАН, НГУ, НГТУ, ИК СО РАН



$\Delta G = -RT \ln K_{асr}$ Jmol ⁻¹	ΔH , Kmol ⁻¹	ΔS , Jmol ⁻¹ K ⁻¹
-6626.36	-15.63	-32.6 ± 0.3

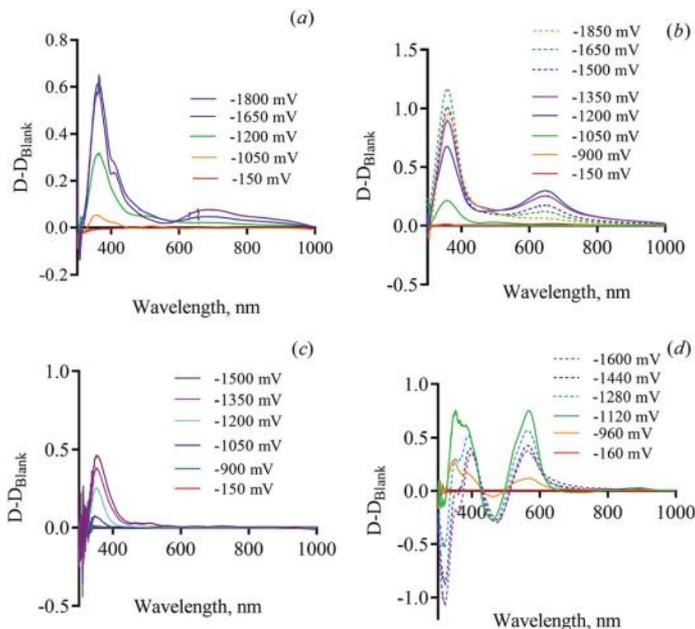
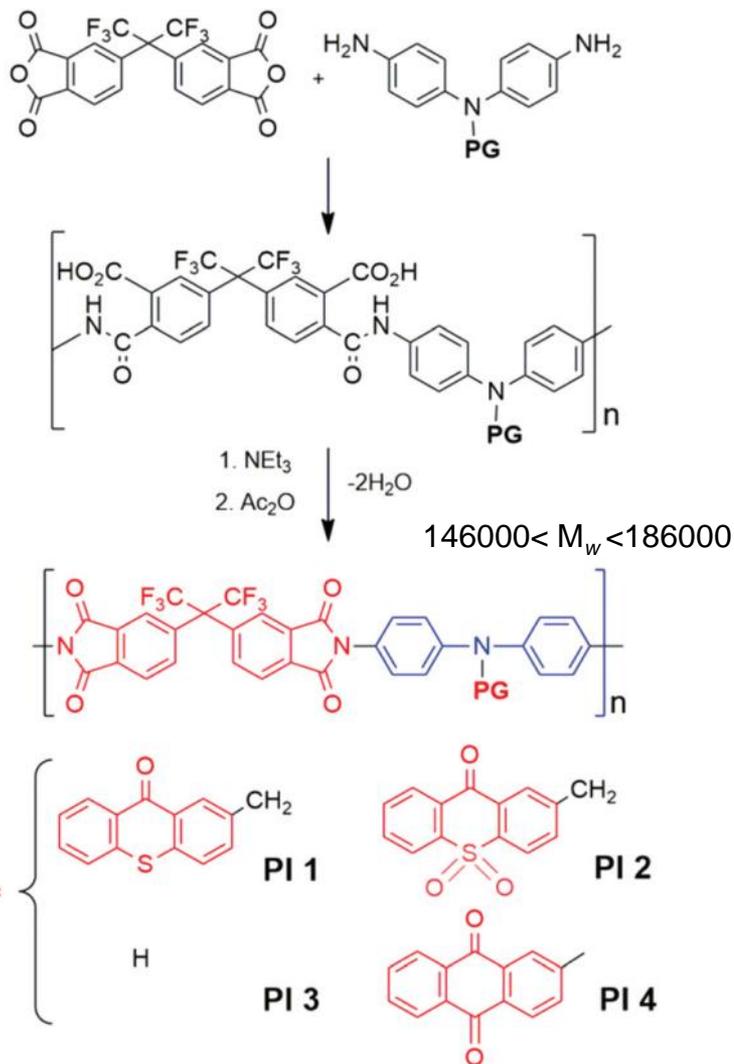


Длина волны записи **473 нм**

D.I. Derevyanko, V.V. Shelkovnikov, V.Y. Kovalskii, I.L. Zilberberg, S.I. Aliev, N.A. Orlova, V. D. Ugozhaev. *ChemistrySelect* 2020, 5, 11939–11947 DOI: 10.1002/slct.202002163

Продемонстрирована возможность записи микроструктур с использованием лазерного излучения $\lambda=473$ нм в гибридном фотополимерном материале, sensibilizированном образующимся КПЗ.

Полиимиды с пendantsными группами на основе 9Н-тиоксантен-9-она: синтез, термическая стабильность, электрохимические и электрохромные свойства НИОХ СО РАН, University of Bremen

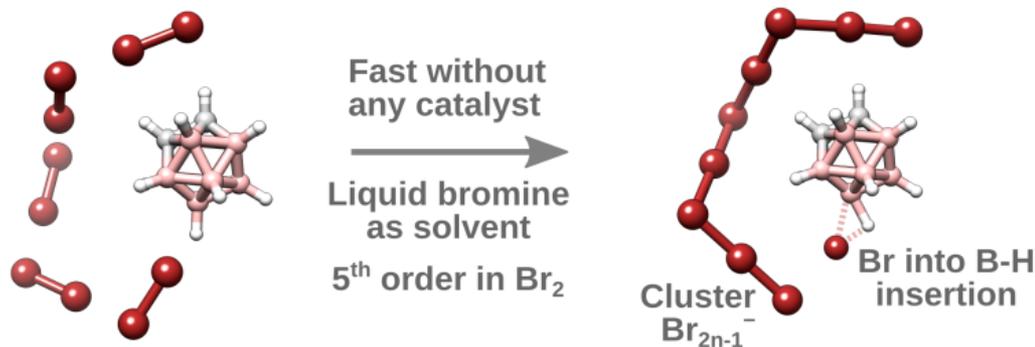


Электрохромные свойства:
(a) PI 1
(b) PI 2
(c) PI 3,
(d) PI 4.

Синтезированные могут применяться в органической электронике для создания устройств энергонезависимой памяти резистивного типа на полимерной основе с низким вольтажом переключений

Аномальный порядок реакции по бромину: участие кластеров брома в некаталитическом бромировании карборанов

Реакции некаталитического бромирования *o*- и *m*-карборанов элементарным бромом имеют первый порядок по субстрату и очень высокий, приблизительно 5-й(!), порядок по бромину. Расчетные барьеры этих реакций резко понижаются по мере добавления молекул брома в состав квантово-химической системы. Эти факты указывают на кластерный механизм бромирования, при котором переходное состояние стабилизируется анионными кластерами брома Br_{2n-1}^- .



Кинетический изотопный эффект дейтерия, измеренный для реакции бромирования смеси 2 and 9,10-D₂-2, равный 2.0, свидетельствует о том, что на лимитирующей стадии реакции имеет место разрыв связи B-H.

Разработка технологии распознавания «химического образа» сложных систем, объектов и процессов природного и антропогенного происхождения



Лаборатория экологических исследований и хроматографического анализа Методология многовекторного диагностического профилирования и генерация многомерного образа сложных систем

Объект или процесс

Информационный модуль

Аналитический модуль

Многовекторные хроматографические диагностические профили

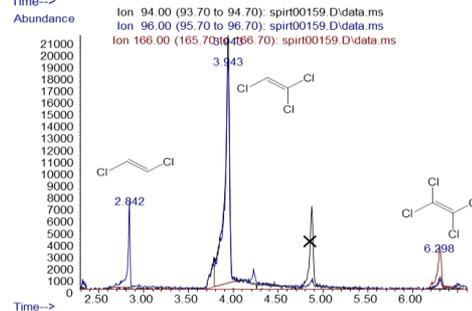
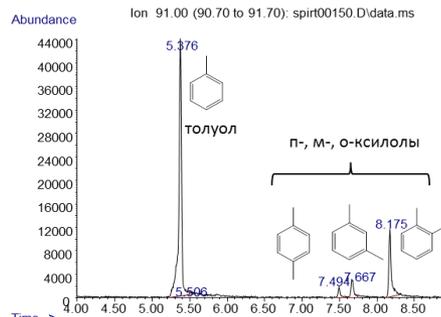
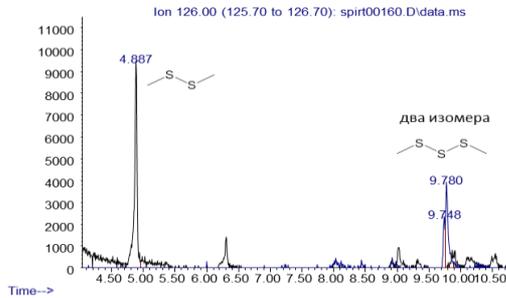
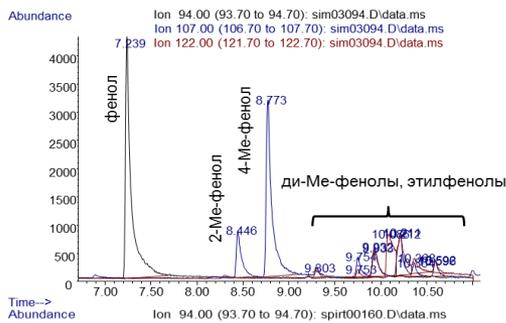
Генерация и дискриминация диагностических и характеристичных признаков

Генерация многомерного образа

Установление правил распознавания образа

Идентификация объекта или процесса

Профилирование и генерация образа «запахов» г. Новосибирска



• Методом хромато-масс-спектрометрии на примере сложных систем природного и антропогенного происхождения получены многовекторные диагностические профили с использованием характеристических ионов целевых соединений

• Установлено, что многовекторные диагностические профили и спектральные соотношения характеристичных ионов являются характерными и дискриминантными признаками многомерного образа сложных систем

• Предложенный подход позволяет идентифицировать вещества, объекты, процессы, источники загрязнения объектов, маркеры объектов и процессов

• Разработанный алгоритм эффективно использован для решения фундаментальных и прикладных задач аналитической химии, экологической химии, химической экологии, фитохимии, биологии и медицины

- Госконтракт с правительством Новосибирской области, 2020 г.
- Контракт с мэрией г. Новосибирска, 2020 г.
- РФФ № 20-64-46011
- РФФ № 19-14-00138
- *Rus. J. Bioorg.Chem.* 2019. doi: <https://doi.org/10.1134/S1068162019070070>

Бетоксовит

В 2020 году зарегистрирована биологически активная добавка на основе бетулоновой кислоты, производимой в ОХП НИОХ СО РАН.

НИОХ СО РАН – единственная организация в мире, выпускающая продукт на основе бетулоновой кислоты.

Зарегистрирован товарный знак



Премия Сибирского отделения РАН имени В.А. Коптюга



Постановлением Президиума СО РАН

от 22.10.2020 N280

с.н.с. НИОХ СО РАН,

к.х.н. СОКОЛОВОЙ Анастасии Сергеевны

присуждена Премия им. В.А. Коптюга

за работы

в области химической экологии




ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
"СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК"
(СО РАН, СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РАН)
ПРЕЗИДИУМ
ПОСТАНОВЛЕНИЕ

22.10.2020

Новосибирск

№ 280

Об итогах конкурса молодых ученых - 2020 по присуждению премий имени выдающихся ученых Сибирского отделения РАН

В соответствии с постановлением Президиума СО РАН № 95 от 26.03.2020 «О конкурсе молодых ученых - 2020 по присуждению премий имени выдающихся ученых Сибирского отделения РАН», на основании решений объединенных ученых советов СО РАН по направлениям науки Президиум федерального государственного бюджетного учреждения «Сибирское отделение Российской академии наук» ПОСТАНОВЛЯЕТ:

1. Утвердить перечень лауреатов конкурса молодых ученых - 2020 по присуждению премий имени выдающихся ученых Сибирского отделения РАН (далее - Конкурс):
- к.ф.-м.н. Мерзлякин Борис Сергеевич (федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»), автор работы «Эффективное действие в шестимерных суперсимметричных калибровочных теориях» - премия имени И.Н. Векса - за работы в области математической физики;
- к.ф.-м.н. Сковородин Дмитрий Иванович (Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерной физики им. Г.И. Булеры Сибирского отделения Российской академии наук), автор работы «Исследование взаимодействия молекул и потоков плазмы с поверхностью» - премия имени Г.И. Булеры - за работы в области ядерной физики, термоядерного синтеза и физики плазмы;
- Р.Д. Шеремет Евгений Сергеевич (федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»), автор работы «Анализ и модификация углеродных

9 июня 2021 года исполняется 90 лет
со дня рождения
академика Валентина Афанасьевича Коптюга



Спасибо за внимание!

