Форма сбора сведений, отражающая результаты научной деятельности организации в период с 2015 по 2017 год, для экспертного анализа

Организация: Федеральное государственное бюджетное научное учреждение Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук
ОГРН: 1030204207582

I. Блок сведений об организации

п/п	Запрашиваемые сведения	Характеристика
РЕФЕРЕНТНЫЕ ГРУППЫ ОРГАНИЗАЦИИ		
1	Тип организации	Научная организация
2	Направление деятельности организации	8. Физическая химия, химическая физика, полимеры **Все дальнейшие сведения указываются исключительно в разрезе выбранного направления.**
2.1	Значимость указанного направления деятельности организации	31%.
3	Профиль деятельности организации	I. Генерация знаний
4	Информация о структурных подразделениях организации	Институт физики молекул и кристаллов – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Лаборатория антиферромагнетиков и ферритов Исследования физических свойств новых магнитных материалов в условиях воздействия света, упругих напряжений, электрических и магнитных полей. Объектами исследований являются мультиферроики моно- и поли- кристаллы с магнитными и электрическими неоднородностями, эпитаксиальные пленки и многослойные структуры, нанокристаллические материалы. Лаборатория теоретической физики Нелинейная динамика, фазовые переходы,

		стрейнтроника, ферромагнитные материалы, мультиферроики,молекулярные системы, метал – органические интерфейсы. В лаборатории проводится комплексное исследование структур пониженной размерности: органические молекулы, магнитные материалы, жидкие кристаллы и углеродные кластеры. Исследования включают в себя разработку математических моделей и методик расчета динамики фазовых и конформационных переходов в сложных системах пониженной размерности, а также изучение электронных процессов в сложных молекулах. Лаборатория физики твердого тела Исследование ориентационной неустойчивости, механизмов образования и разрушения пространственно-периодических структур в жидких кристаллах, динамики поверхностного ориентационного упорядочения в жидких кристаллах на границе с твердым телом, динамики локализованных и пространственно-периодических структур в жидких кристаллах, процессов зарождения и динамика дефектов пространственно-временных структур, структуры и свойств фоточувствительных и ЖК полимеров Группа физики наноструктурных материалов Изучение наноструктурных материалов, полученных методами интенсивной пластической деформации (ИПД) Лаборатория физики атомных столкновений Исследование процессов рассеяния электронов на сложных органических молекулах методами масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов (МСОИ РЗЭ) и спектроскопии проходящих электронов (СПЭ). Лаборатория масс-спектрометрии отрицательных ионов и спектроскопии молекул Исследование резонансного захвата электронов молекулами, масс-спектрометрия отрицательных и положительных ионов, молекулярная спектроскопия, квантовая химия, термохимия, физика возбужденных состояний и быстропротекающих внутримолекулярных процессов, элементарные акты физико-химических превращений и их энергетика, кинетика мономолекулярного распада, аналитическое приборостроение. Группа фотоэлектронной спектроскопии Исследование механизмов образования отрицательных молекулярных ионов (ОМИ) на основе масс-спектрометрии отрицательных ионов

		резонансного захвата электронов молекулами (МСОИ РЗЭ) в комплексе с несколькими вспомогательными методами, используемыми для изучения нейтральной молекулы, материнской по отношению к ОМИ, такими, как фотоэлектронная спектроскопия, микроволновая спектроскопия и УФ спектроскопия оптического поглощения, возбуждения и люминесценции. Лаборатория физики полимеров Исследование особенностей переноса заряда в тонких пленках органических диэлектриков при наличии различных внешних факторах и физических полей. Изучаются квантоворазмерные явления, обусловленные формированием в структуре полимерных пленок квантовых нитей и квантовых ям в виде слоев квазидвумерного электронного газа. Уфимский Институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Лаборатория стереорегулярных полимеров. Направление исследований: каталитический синтез стереорегулярных полимеров; модификация синтетических и биогенных полимеров для материалов биомедицинского назначения. Лаборатория синтеза функциональных полимеров. Направление исследований: Синтез, изучение свойств и термическая модификация фталидсодержащих полигетероариленов (полиариленфталидов, полиарилендифталидов), в том числе стереорегулярных и оптически активных, а также полигетероариленов с другими типами кардовых группировок (сульфофталидная, фталимидиновая) и их сополимеров с мономерами винилового ряда. Лаборатория химической физики. Направление исследований: химия возбужденных состояний молекул, полимеров, комплексов металлов и энергонасыщенных интермедиатов в люминесцентных процессах. Развитие теоретических методов (ab initio, DFT, in silico, MM и MD) исследования молекулярной энергетики, реакционной способности, биологической активности органических соединений Лаборатория координационной химии. Направление исследований: физико-химические закономерности экстракции, сорбции и комплексообразования

		металлов и фармаконов с моно- и полидентатными сера- и азоторганическими соединениями; извлечение, разделение и концентрирование редких и благородных металлов; синтез координационных соединений металлов платиновой группы с трис-N-замещенными-1,3,5-триазинами; механизм фиксации и активации молекулярного кислорода на комплексах с ионами металлов переменной валентности Лаборатория химической кинетики. Направление исследований: Изучение кинетики, продуктов и механизма реакций, протекающих с участием высокореакционных интермедиатов – нитрозооксидов и пероксильных радикалов; кинетические исследования антиоксидантной активности природных и синтетических биологически активных органических соединений; синтез гетероциклических соединений на основе природных соединений серы. Лаборатория окислительных процессов. Направление исследований: кинетика и механизм окислительных процессов с участием молекулярного кислорода, соединений, содержащих активный кислород, и других сильных окислителей. Направленный поиск ингибиторов радикально-цепных процессов. Лаборатория электрохимии. Направление исследований: электрохимическая энергетика – научные основы создания электрохимических аккумуляторов с высокими удельными энергетическими и ресурсными характеристиками Лаборатория физико-химических методов анализа. Направление исследований: установление структуры и исследование физико-химических свойств получаемых в институте соединений, изучение стереохимии и конформационного состояния сложных молекул методами ЯМР, ИК и электронной спектроскопии, хроматомасс-спектрометрии, поляриметрии; определение чистоты веществ и количественное определение состава смесей органических соединений методом газовой и высокоэффективной жидкостной хроматографии и элементного анализа. Лаборатория биоорганической химии и катализа. Направление исследований: химия и биологическая активность растительных веществ флоры РФ; их биогенез и функция; трансформации природных соединений (ди-, тритерпеноидов, алкалоидов, урацила и др.), разработка методов синтеза гетероциклических соединений с целью создания

		инновационных лекарственных средств; создание новых высокоэффективных реагентов для нефтегазового комплекса с учетом требований экологии, утилизация вредных промышленных отходов Лаборатория синтеза низкомолекулярных биорегуляторов. Направление исследований: Синтез простагландинов, эпотилонов, карбапенемов и их аналогов, новой серии полигетерофункционализированных циклопентенонов из гексахлорциклопентадиена. Изучение цитотоксических, антивирусных, антибиотических,антитромбозных и антиглаукомных свойств синтезированных соединений. УфИХ УФИЦ РАН Лаборатория биорегуляторов насекомых. Направление исследований: разработка методов синтеза хиральных биологически и фармакологически активных веществ из доступного сырья природного и синтетического происхождения, изучение хемо-, регио- и стереоселективных трансформаций доступных природных липидов, терпеноидов и стероидов с целью получения потенциально полезных для медицины, сельского хозяйства и химической науки соединений, разработка синтеза хиральных макролидов, содержащих фармакофорные фрагменты, исследование закономерностей восстановления перекисных продуктов озонолиза циклических и ациклических, функционализированных олефинов различной степени замещенности (в том числе производных терпеноидов и липидов) органическими азотсодержащими восстановителями, выделение и идентификация продуктов восстановления. Лаборатория фармакофорных циклических систем. Направление исследований: разработка методов синтеза биологически активных соединений нативного строения и аналогов на основе левоглюкозенона и других углеводов, синтез кислород- и азотсодержащих гетероциклических систем, в том числе пиримидинового ряда, получение аминоарилзамещенных алкенов, исследование их гетероциклизации, получение на их основе антикоррозионных и биологически активных веществ.

5	Информация о кадровом составе организации	- общее количество работников организации; 2015 г. – 1221 2016 г. – 1117 2017 г. – 1311 - общее количество научных работников (исследователей) организации: 2015 г. – 771 2016 г. – 767 2017 г. – 790 - количество научных работников (исследователей), работающих по выбранному направлению, указанному в п.2: 2015 г. – 186 2016 г. – 191 2017 г. – 169
6	Показатели, свидетельствующие о лидирующем положении организации	Лидирующее положение ИФМК УФИЦ РАН в области химической физики и спектроскопии отдельных молекул определяется тем обстоятельством, что в Уфе сохранилась и успешно работает школа масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов, созданная в середине 60-х годов XX века под руководством проф. В.И. Хвостенко. В распоряжении коллектива имеется три оригинальных спектрометра отрицательных ионов (построенных на базе масс-спектрометра МИ1201), фотоэлектронный спектрометр, флуоресцентный и спектрометр УФ-поглощения, имеются вычислительные мощности для проведения квантово-химических расчетов высокого уровня. Коллектив активно сотрудничает с отечественными (А.С. Комолов, физический факультет СПбГУ; А.А. Горюнков химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Ю.Н. Елькин, ТИБОХ ДВО РАН) и зарубежными (S. Ptasinska University of Notre Dame, USA, J. Fedor, J Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Czech Republic, S. Matejcik, Comenius University, Slovakia, I. Fabrikant, University of Nebraska, USA) специалистами в области исследований электронных свойств органических соединений, что выражается во взаимных визитах и совместных публикациях в высокорейтинговых журналах. В области исследования полимеров лидирующее положение Института физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН обусловлено тем, что направление физика электропроводящих полимеров и материалов на их основе развивается в институте последовательно и комплексно на протяжении

		последних двух десятилетий. Уфимская школа органических полимерных проводников базируется исключительно на достижениях отечественной синтетической химии в области создания органических полимерных материалов оригинального строения, аналогов которых в мире нет. Кроме того, в мире развивается электроника материалов на основе соединений с делокализованными Пи-электронами. В ИФМК большинство оригинальных достижений в области материаловедения органических электронных материалов связано с новым принципом электронного строения полимерных цепей - в них отсутствует сопряжение валентных электронов. В связи с этим эти объекты имеют широкую запрещенную зону более 4 эВ, что позволяет в большом диапазоне варьировать электронные свойства материалов за счет изменения плотности электронных состояний внутри области запрещенных энергий. Важным преимуществом является тесное взаимодействие между лабораториями внутри Института, совместных исследованиях и публикациях. ИФМК УФИЦ РАН является абсолютным лидером в указанном направлении в Российской Федерации также и потому, что процессы резонансного захвата электронов в нашей стране более нигде не исследуются. УфИХ УФИЦ РАН один из старейших институтов в составе УФИЦ РАН. Институт является крупным исследовательским центром, широко известным своими исследованиями в области органической и биоорганической химии, многостадийного органического синтеза биологически активных веществ, имеющих важное значение для медицины и сельского хозяйства, каталитического синтеза и модификации полимеров, кинетики и механизма окислительных процессов, люминесцентных реакций, электрохимии и физикохимии растворов. Во главе института в разные годы стояли известные ученые: академик С.Р. Рафиков, академик Г.А. Толстиков, академик М.С. Юнусов. В институте в 2015-2017 гг. в составе 12 лабораторий работало около 145 научных работников, из них в настоящее время 1 академик РАН, 3 академика АН РБ и 1 член-корреспондент АН РБ, 27 докторов, 95 кандидатов наук, более 80 молодых ученых в возрасте до 39 лет, среди сотрудников имеются 4 лауреата Государственной

		премии РФ в области науки и техники. В УфИХ УФИЦ РАН работает научная школа М.С.Юнусова "Химия веществ природного происхождения, структура, свойства, синтез и биологическая активность". К важнейшим научным достижениям института относятся: создание практичных схем полного синтеза низкомолекулярных биорегуляторов, имеющих важное практическое значение. По результатам исследований созданы препараты и материалы для медицины и сельского хозяйства: препараты противовоспалительного и иммунорегулирующего действия, фунгицидные препараты, ростостимулирующие средства, пиретроидные и простагландиновые препараты. В рамках выполнения госконтрактов в рамках ФЦП «Фарма-2020» в Институте созданы препарат для акушерства и гинекологии на основе стероида и 11-дезоксимизопростола и новое антиаритмическое лекарственное средство на основе алкалоида лаппаконитина, проведены их доклинические исследования. УфИХ УФИЦ РАН является лидером РФ в области химии феромонов насекомых и создания препаратов на их основе для контроля численности вредоносных насекомых, для регулирования поведения, жизнедеятельности и оздоровления медоносных пчел, Ведутся пионерские исследования в области электрохимической энергетики. Одним из наиболее важных направлений работ Института является создание нового поколения электрохимических накопителей энергии - литий-серных аккумуляторов, достоинствами которых являются высокая удельная энергия (300-500 Вт*час/кг), низкая стоимость, доступность серы, экологичность. Исследуются закономерности электрохимических процессов, протекающих на электродах из активных металлов (лития, натрия). Разработаны оригинальные каталитические системы и способ проведения транс-полимеризации изопрена, позволившие впервые в России наладить промышленное производство синтетической гуттаперчи в г. Стерлитамаке. Институт – лидер в разработке методов анализа и управления полицентровостью каталитических полимеризационных процессов, в т.ч. в технологиях, базирующихся на применении не имеющих аналогов в мире ресурсо- и энергосберегающих турбулентных реакторов.

		Ведутся работы по исследованию ароматических нитрозооксидов - лабильных частиц с уникальными свойствами. Исследование механизма их расходования привело к обнаружению новой реакции. Более тридцати пяти лет в институте проводятся работы, получившие признание специалистов, по поиску и синтезу новых перспективных реагентов для гидрометаллургии цветных, редких и благородных металлов. Ряд реагентов, нашли промышленное применение, что позволило оптимизировать технологические процессы при переработке сложных видов минерального сырья с получением целевых продуктов. УфИХ УФИЦ РАН безусловный мировой лидер в изучении реакционной способности молекул, содержащих активный кислород, разработке новых высокоэффективных окислительных реагентов, функционализации органических соединений. В области синтеза и термических превращений высокотермостойких фталидсодержащих полигетероариленов институт занимает одно из ведущих мест в мире. Синтезирован новый класс фталидсодержащих полигетероариленов (полиарилендифталиды). Впервые получены склонные к упорядочению, стереорегулярные полиарилендифталиды, в том числе высококристаллические. Наличие в структуре полиарилендифталидов sp3-гибридизированных атомов углерода, соединенных ординарной связью, делает их перспективными термическими предшественниками твердых (алмазоподобных) углеродных материалов, а также терморасширяющихся тепло- и термозащитных покрытий с повышенной абляционной стойкостью. Лидирующие позиции в стране и мире занимают специалисты Института в области квантовой химии, исследований механизмов химических реакций и интермедиатов химических процессов, молекулярной энергетики и термохимии. В целом, значительный прогресс в разработке новых лекарственных препаратов может быть достигнут при объединении усилий специалистов тонкого органического синтеза и ученых Института, активно использующих методы молекулярного докинга.

II. Блок сведений о научной деятельности организации (ориентированный блок экспертов РАН)

п/п	Запрашиваемые сведения	Характеристика
НАУЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОРГАНИЗАЦИИ		
7	Наиболее значимые научные результаты, полученные в период с 2015 по 2017 год.	ИФМК УФИЦ РАН 1. С помощью уникальных экспериментальных методов – спектроскопии диссоциативного захвата электронов (DEAS – Dissociative Electron Attachment Spectroscopy) и спектроскопии проходящих электронов (ETS – Electron Transmission Spectroscopy) – в газовой фазе исследованы изолированные молекулы биологически активных соединений, включая лекарственные препараты, витамины, антиоксиданты, яды, пестициды, гормоны, одоранты, индукторы устойчивости растений к стрессовым условиям, радиосенсибилизаторы, использующиеся при лучевой терапии опухолевых тканей. На основе полученных данных впервые показано, что захват квазисвободных электронов в клетках живых организмов может инициировать каскад процессов, составляющих молекулярный механизм биологических реакций, протекающих в системах детоксификации ксенобиотиков (цитохром P450), генерирования внутриклеточной энергии (митохондрии и хлоропласты), а также в рецепторах обонятельной системы. Результат является фундаментальным, имеет междисциплинарный характер и важен в прикладных областях, в первую очередь, для развития фармацевтики (механизмы действия лекарств, включая побочные эффекты), персонифицированной медицины (адресная доставка и эффекты антиоксидантов, механизм токсичности на молекулярном уровне). 2. Различия в электронном сродстве между линейными и ангулярными молекулами полициклических углеводородов обусловлены специфическими особенностями компоновки электронной орбитальной структуры. 3. Получены новые данные об электронно-возбужденных автораспадных состояниях отрицательных молекулярных ионов. Установлено, что доминирующим механизмом образования электронно-возбужденных отрицательных ионов молекул с отрицательным сродством к электрону является межоболочечный резонанс. Результат получен на основе комплексного применения масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного

		захвата электронов молекулами (МСОИРЗЭ) и УФ спектроскопии. Основой послужила близость энергий резонансных состояний отрицательных ионов, зарегистрированных в изученных соединениях методом МСОИРЗЭ, и синглетных переходов в УФ спектрах этих же соединений, откуда следует, что синглетные электронно-возбужденные состояния нейтральных молекул являются материнскими для указанных ионов. Для изучения других подобных механизмов, к каковым относится, в частности, электронно-возбужденный фешбаховский резонанс (ЭВФР), на примере тетрацианохинодиметана (tetracyanoquinodimethane – TCNQ) разработана и реализована методика регистрации в УФ спектрах оптического поглощения триплетных переходов, которые представляют собой материнские состояния отрицательных ионов, образующихся по механизму ЭВФР. Учитывая тот факт, что эксперименты МСОИРЗЭ и УФ проводятся в разных средах – первый в газовой фазе, а второй в растворе, для корректности сравнения их данных изучено влияние растворителя на энергии синглетных и триплетных переходов, регистрируемых в УФ спектрах. 4. В результате проведения комплексного исследования электронных свойств границ раздела металл(полупроводник)/органический диэлектрик (полимер), в условиях нестационарного воздействия таких факторов и физических полей, как магнитные и электрические поля, упругая и пластическая деформации, фазовые переходы первого и второго рода в металлах, установлены основные закономерности изменения параметров потенциального барьера на границе раздела металл/полимер и электронных свойств органического транспортного слоя, приводящие к электронному фазовому переходу типа диэлектрик-металл. В частности, обнаружены эффект огромного магнетосопротивления в малых магнитных полях и «дистанционное переключение проводимости» структуры металл/полимер/метал за счет обеспечения электрического контакта одного из электродов с металлом, претерпевающим фазовый переход и другие. 5. Исследованы магнитоэлектрические эффекты в мультиферроидных материалах, бризеры в нематических жидких кристаллах (НЖК), конформационная динамика двухкомпонентных

		бистабильных полимерных молекул, низкочастотная динамика магнитных скирмионов в ферромагнетиках. Разработан новый механизм магнитоэлектрического эффекта в редкоземельных ферритах гранатах на магнитных доменных границах (ДГ), возникающий из-за R-Fe обменного взаимодействия, исследовано взаимодействие сегнетоэлектрических и магнитных доменных границ в феррите висмута. Обнаружены высокоамплитудные нелинейные пульсационные колебания межфазных ДГ в режиме авторезонанса в ромбических антиферромагнетиках, продемонстрировано влияние бризероподобных дефектов на динамику роллов в НЖК, показана возможность управления конформационной динамикой двухкомпонентных бистабильных полимерных молекул с неэквивалентными по энергии устойчивыми состояниями, рассчитаны спектры низкочастотных мод возбуждений скирмионного состояния в наноточках. УфИХ УФИЦ РАН 1. В Уфимском институте химии получены новые «макромономеры» – диарилендифталиды симметричного и несимметричного строения, на основе которых синтезированы новые сополиариленфталиды периодического строения с электронодонорными и электроноакцепторными блоками различной длины, склонные к избирательной адсорбции различного класса органических низкомолекулярных соединений, показавшие высокую эффективность в созданиии хемосенсоров в системах аналитического распознавания типа "электронный язык". (УфИХ РАН, исполнители: Крайкин В.А., Янгиров Т.А., Сахипова И.И., Гилева Н.Г., Седова Э.А., Ионова И.А.) 2. В лаборатории химической кинетики при исследовании механизма фотоокисления 2-метил-4-[(2Е)-1-метилбут-2-ен-1-ил]фенилазида была обнаружена новая окислительно-восстановительная перегруппировка нитрозооксида, которая имеет место при наличии метильного заместителя в орто-положении по отношению к нитрозооксидной группе. Терминальный атом кислорода цис/син-формы нитрозооксида отрывает Н-атом заместителя с образованием гидропероксинитрена, который далее изомеризуется путем миграции

		гидроксильного радикала к метиленовой группе в нитрозобензиловый спирт. (УфИХ РАН, Чайникова Е.М., Сафиуллин Р.Л.) 3. В лаборатории синтеза стереорегулярных полимеров разработан ряд лекарственных форм в т.ч. на биополимерных лизируемых носителях (полисахаридах) с приданной биологической активностью (пленки, гели, объемные импланты) – антимикробной, противовоспалительной, цитостатической. Разработаны лекарственные пленки для профилактики и лечения инфекционных поражений глаз на основе поливинилового спирта и арабиногалактана, содержащие антибиотик левофлоксацин, и на основе поливинилового спирта с дигидрокверцетином, содержащие антибиотик моксифлоксацин (УфИХ РАН, исполнители: к.х.н. Мударисова Р.Х., к.х.н. Бадыкова Л.А.). Для использования при оперативном лечении глаукомы разработан дренаж из гидрогеля на основе модифицированных биогенных полимеров - гиалуроновой кислоты и хитозана, содержащий цитостатик - митомицин С. Полимерный дренаж обладает высокой биосовместимостью, его использование приводит к уменьшению токсического эффекта цитостатика и стабилизации внутриглазного давления в течение длительного времени после операции. (Уфимский Институт химии РАН. Исполнители: д.х.н. Колесов С.В., д.х.н. Сигаева Н.Н., м.н.с. Вильданова Р.Р.) Выполнены исследования по механохимической модификации ряда полисахаридов (арабиногалактана, хитозана, пектина) некоторыми пестицидами. Показано, что в результате механохимически активированного комплексообразования малорастворимых пестицидов с функциональными группами полисахаридов увеличивается скорость их перехода в раствор, содержание действующих веществ в растворе и их биодоступность при отсутствии фитотоксичности. Выявлена высокая стабильность и гербицидная активность механохимически полученных комплексов хлорсульфурона с полисахаридами (арабиногалактаном, хитозаном и пектином), повышение урожайности культурных растений (овса посевного и пшеницы) при снижении нормы расхода хлорсульфурона. (УфИХ РАН, исполнители: к.х.н. Мударисова Р.Х., к.х.н. Бадыкова Л.А., Коптяева Е.И.).

		4. Впервые получены сополиариленфталиды, содержащие в полимерной цепи структуры, построенные по типу присоединения «голова к голове» (ГГ) и «голова к хвосту» (ГХ). Синтезирована серия сополимеров дифенилоксидного ряда с различным соотношением дифталидных ГГ и фталидных ГХ групп. Показано, что введение дифталидных групп приводит к увеличению физико-механических и адгезионных характеристик образующихся сополимеров. При значительном преобладании одной из структур пленки сополимеров изотропные и хрупкие, а при промежуточных соотношениях дифталидных и фталидных групп (1:20-30) – микрофазно-разделенные и прочные. Руководитель работ - В.А. Крайкин; исполнители - Т.А. Янгиров, Э.А. Седова, Н.Г. Гилева, А.А. Фатыхов (Уфимский Институт химии РАН) 5. Обнаружено, что эффективность влияния ионов тяжелых металлов Pb(II), Co(II), Zn(II), Cd(II) на флюоресценцию триптофана может служить мерой взаимодействия металлов с аминокислотами и, следовательно, опосредованной характеристикой эффективности их биоаккумуляции. Результаты по аккумуляции металлов бактериями рода Bacillus полностью коррелируют с константами тушения ФЛ Trp, которые убывают в ряду Pb(II) > Co(II) ≥ Zn(II) > Cd(II). Полученные результаты позволяют надеяться, что метод тушения ФЛ Trp ионами металлов, отличающийся простотой и высокой чувствительностью, может найти применение при экспресс-оценке способности микроорганизмов накапливать различные металлы. (УфИХ РАН, исполнители: Хурсан С.Л., Остахов С.С., Каюмова Р.Р.) 6. Изучены спектрально-флуоресцентные свойства некоторых 3-амино-12-N-производных (-)-цитизина (потенциальных ингибиторов циклооксигеназы-2 (ЦОГ-2)): определены их относительные квантовые выходы и времена жизни в электронно-возбужденном состоянии. Оценена эффективность связывания цитизинов с ЦОГ-2 в лиганд-белковый комплекс по значению констант тушения флуоресценции L-тирозина, L-триптофана, L-серина и L-аргинина – аминокислот, играющих ключевую роль в работе фермента. Показано, что по тушению люминесценции аминокислотных остатков белков триптофана и тирозина 3 аминопроизводными 12-N-

		метилцитизина может быть оценена эффективность их противовоспалительного действия. (УфИХ РАН, исполнители: Хурсан С.Л., Борисевич С.С., Остахов С.С., Цыпышева И.П., Каюмова Р.Р.) 7. Изучены термоэлектрохимические процессы, протекающие в литий-серных аккумуляторах при их заряде и разряде. Обнаружено, что основной вклад в тепловые эффекты, сопровождающие электрохимическое восстановление серы и электрохимическое окисление сульфида лития в литий-серных аккумуляторных ячейках, вносят процессы прямого химического взаимодействия серы и высших полисульфидов лития (Li2Sn, n≥6) с металлическим литием. Методами электрохимической дилатометрии, электрохимической импедансной спектроскопии и электрохимической калориметрии установлено, что при заряде литий-серных аккумуляторных ячеек на отрицательном электроде происходит образование мелкодисперсных осадков металлического лития, обладающих высокой химической активностью по отношению к сере и высшим полисульфидам лития. Взаимодействие мелкодисперсного металлического лития с серой и полисульфидами лития сопровождается интенсивным тепловыделением. Впервые установлено, что при электрохимическом восстановлении серы и окислении сульфида лития образуются сольватные комплексы полисульфидов лития с апротонными диполярными растворителями, входящими в состав электролитных систем. Состав и свойства образующихся сольватных комплексов определяют энергетические характеристики литий-серных аккумуляторов. (УфИХ РАН, исполнители: Колосницын В.С., Кузьмина Е.В., Нургалиев А.Р., Мочалов С.Э., Карасева Е.В., Иванов А.Л.) 8. Предложена схема окисления 5-гидрокси-6-метилурацила молекулярным кислородом в щелочных водных растворах. Выделены и идентифицированы методом ЯМР спектроскопии промежуточные и конечные продукты реакции. Впервые определены константы и термодинамические характеристики кислотно-основного равновесия синтезированных N- и O-метилпроизводных 5-гидрокси-6-метилурацила и 5-замещенных производных 6-метилурацила в водных щелочных растворах. (УфИХ РАН, исполнители: Иванов С.П., Петрова С.Ф., Нугуманов Т.Р., Ахияров

		А.А.) С применением методов двумерной корреляционной ЯМР спектроскопии установлены структуры аддуктов Дильса-Альдера 2-оксо- и 4-оксо- N-Me производных (-)-цитизина с N-замещенными малеимидами. Для всего ряда аддуктов по данным NOESY спектров найдено, что в термических условиях протекания реакции для 2-оксо производного из четырех возможных стереоизомеров образуется единственный β-endo изомер, тогда как для 4-оксо производных наблюдается образование □-endo и β-endo стереоизомеров (УфИХ РАН, исполнители: Лобов А.Н., Цыпышева И.П., Петрова П.Р.) 9. Предложена фармацевтическая композиции на основе 1,3-диметил-5-карбоксиурацила и глицирризиновой кислоты, обладающая стимулирующим действием на репаративную регенерацию эпителиальной, нервной и костной тканей, превосходящая по эффективности препарат Ксимедон. Впервые получены данные о возможности фармакологической стимуляции образования костного матрикса. Лекарственная композиция стимулирует репаративную регенерацию, ускоряет синтез нуклеиновых кислот и белков, способствует делению клеток, повышает активность нейтрофилов и макрофагов, стимулирует антителообразование и лейкопоэз. (УфИХ РАН, исполнители: Муринов Ю.И., Кабальнова Н.Н., Грабовский С.А.) 10. Впервые предложен механизм прооксидантного действия фармакологически активных производных урацила, заключающийся в фиксации и активации молекулярного кислорода на комплексах Cu2+ с производными урацила. В результате окислительно-восстановительной реакции лиганд отдает электрон иону Cu2+ с образованием катион- радикала, а медь восстанавливается до одновалентной. Фиксация молекулярного кислорода протекает на ионе Cu+ с последующим образованием радикала супероксид-аниона, иона Cu2+ и окислением лиганда. (УфИХ РАН, исполнители: Муринов Ю.И., Кабальнова Н.Н., Грабовский С.А., Мишинкин В.Ю.) 11. Разработан способ доизвлечения и концентрирования палладия(II) из «бедного» раствора аффинажа экстракцией производными 1Н-1,2,4-триазола. Установлено, что палладий(II)

		извлекается количественно из 1 моль/л солянокислых растворов и в оптимальных условиях селективно отделяется от платины(IV) и родия(III). После отделения палладия в рафинате остаются платина и родий. Платина может быть доизвлечена по классической схеме экстракцией трибутилфосфатом, а растворы родия сконцентрированы. Результаты показывают возможность переработки больших по объему и бедных по содержанию производственных растворов, полученных из вторичных ресурсов, и позволяют совершенствовать процесс аффинажа. (УфИХ РАН, исполнители: Голубятникова Л.Г., Хисамутдинов Р.А., Муринов Ю.И.) 12. Разработан новый, не имеющий мировых аналогов, способ повышения активности неодимового катализатора при полимеризации изопрена за счет использования трубчатого турбулентного реактора на стадии топохимического синтеза наноразмерного изопропанольного сольвата хлорида неодима с заданным содержанием изопропилового спирта. Опытно-промышленные испытания показали, что данное технологическое решение позволяет получать неодимовый катализатор со стабильно высокой каталитической активностью. При этом сокращается расход дорогостоящего хлорида неодима, а полимер – СКИ-5 характеризуется лучшими показателями молекулярной структуры. (УфИХ РАН, исполнитель: д.х.н. Захаров В.П., д.х.н. Мингалеев В.З.) 13. В лаборатории синтеза низкомолекулярных биорегуляторов УфИХ УФИЦ РАН разработан практичный «телескопический» (без постадийного выделения продуктов) вариант получения синтетически важного эпоксилактона Кори и его энантиомера в две стадии с общим выходом 40% исходя из легкодоступных хиральных карбоксамидов, синтезированных на основе аддукта циклопентадиена и дихлоркетена и R-(+)-альфа-метилбензиламина и разделенных колоночной хроматографией на SiO2. (УфИХ РАН, руководитель работ – д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Валиуллина З.Р., к.х.н. Иванова Н.А., асп. Ахметьянова В.А.) 14. На основе аддукта Дильса-Альдера левоглюкозенона и пиперилена разработана схема

		26-стадийного химического синтеза аналога "морского" цитотоксического саркодиктиина А с 14-метилциклогексеновым циклом А, ключевой стадией которой является внутримолекулярная ацетилен-альдегидная конденсация боковых цепей при метилциклогексеновом ядре в 10-членный карбоцикл. Таким образом, впервые получены аналоги элеутезидов с модифицированным циклом А. Предлагаемый ряд позволит установить зависимость цитотоксической активности от строения и выявить более доступные аналоги при сохранении цитотоксической активности. (УфИХ РАН, исполнители: д.х.н. Валеев Ф.А., к.х.н. Шарипов Б.Т., асп. Першин А.А.) 15. Исходя из хирального лактондиола Кори, разработана оригинальная схема синтеза высокоактивного против вируса гепатита В карбануклеозида Энтекавира (ED50 = 3 nM). Эффективность подхода обеспечивается получением из (+)-лактондиола Кори в "one-pot" процедуре гидроксиблокированных производных циклопентилуксусной кислоты и далее ключевого (+)-экзометиленциклопентанового блока для Энтекавира. Суммарный выход (+)-Энтекавира из (+)-лактона составляет ~10%. (УфИХ РАН, руководитель Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Востриков Н.С., к.х.н. Валиуллина З.Р., к.х.н. Иванова Н.А., асп. Лобко И.Ф., асп. Ахметьянова В.А.) 16. Реакцией 1,3-диполярного [3+2]-циклоприсоединения нитронов на основе лаппаконитина и талатизамина получены ранее не описанные гибридные структуры, содержащие пирролизидиновый или изоксазолидиновые кольца, аннелированные по связи N-20-C-19 кольца А нордитерпеновых алкалоидов, установлена стереохимия продуктов присоединения, проведено полное отнесение сигналов протонов и углеродов в спектрах ЯМР 1Н, 13С. Впервые получены производные лаппаконитина, содержащие функциональный заместитель, связанный с атомом С-19 основного углеродного скелета алкалоида С-С связью. (Уфимский Институт химии, руководитель работ - академик М.С.Юнусов; исп. - к.х.н. Е.М. Цырлина, к.х.н. Т.М. Габбасов) 17. На основе диастереомерных аддуктов Михаэля

		левоглюкозенона и циклогексанона разработан синтез аналога природного лактона форакантолида. Создание лактонного цикла основано на расщеплении С-С-связи, что исключает условия сильного разбавления, необходимые для внутримолекулярной лактонизации. Схема адаптирована для синтеза других лактонов, включая макролиды. Проблему спонтанной кетализации циклогексанонового фрагмента, осложняющей использование разработанной ранее схемы синтеза лактонов для получения нативных прототипов, удалось решить только путем восстановления кетогруппы с её регенерацией после стадий манипуляций защитными группами и операций по введению метильной группы в ω-положение будущего лактона. Все последующие стадии укладываются в ранее разработанную схему синтеза лактонов. (Руководитель работ - д.х.н. Ф.А.Валеев; исполнители: к.х.н. Л.Х.Файзуллина, к.х.н. Ю.А.Халилова, Уфимский Институт химии) 18. Показано, что кетопроизводное касторового масла при взаимодействии с гидразингидратом образует макроциклы, в которых одна из карбонильных групп превращена в гидразон, а две остальные связаны азинной функцией, что позволяет получать макролиды из касторового масла в 2 стадии (УфИХ РАН, исполнители: д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., д.х.н. Яковлева М.П., к.х.н. Выдрина В.А., к.х.н. Рублева М.А., д.с.-х.н. Ишмуратова Н.М., член-корр. РАН Толстиков А.Г.) 19. Впервые синтезированы новые производные метиловых эфиров N-ацил-N-[2-(2-циклопентен-1-ил)фенил]глицинов, омылением которых гидроксидом лития в растворе ТГФ-вода получены соответствующие кислоты. Исследованием реакции [3+2]-циклоприсоединения генерируемых при нагревании в ангидридах карбоновых кислот промежуточных мюнхнонов установлено, что: а) аксиально-хиральные изомеры обладают достаточно высоким энергетическим барьером взаимопревращения и при температурах до 120°С не подвергаются изомеризации; б) наличие аксиальной изомерии делает реакцию циклоприсоединения чувствительной к структурным факторам. Показано, что в реакцию внутримолекулярного [3+2]-циклоприсоединения вступает только мюнхнон, образующийся при нагревании анти-атропоизомера N-(4-нитробензоил)- или N-ацетил-N-(2-циклопент-

		2-ен-1-ил-6-метилфенил)глицина с уксусным ангидридом при 120°С. Эта закономерность сохраняется также при расширении этой трансформации к гомологу с циклогексенильным заместителем, где получены аналогичные результаты. Впервые синтезированы производные атропоизомерных N-толуолсульфонил- или N-(2-нитробензол)сульфонил-N-[2-(1-метилбут-2-ен-1-ил)фенил]глицинов и N-толуолсульфонил-N-[2-(2-циклопентен-1-ил)-6-метилфенил]глицина. При изучении их циклизации при взаимодействии с молекулярным йодом получены заслуживающие внимания неординарные результаты. Показано, что взаимодействие атропоизомерных N-толуолсульфонил- или N-(2-нитробензол)сульфонил-N-[2-(1-метилбут-2-ен-1-ил)фенил]глицинов с йодом протекает как стерео- и регио-селективная реакция 9-эндо-циклизации с образованием (5S*,6R*,7R*)-производных 6-йодбензоксазонина. При взаимодействии N-толуолсульфонил-N-[2-(2-циклопентен-1-ил)-6-метилфенил]глицина с йодом наряду с тривиальным продуктом реакции галогенлактонизации с 3-иод-2,3,3a,6,7,11b-гексагидробензо[e]циклопента[g][1,4]оксазоциновым ядром получен необычный 11b,1-дегидроаналог 1,3-дииод-3,3a,6,7-тетрагидробензо[e]циклопента[g][1,4]оксазоциновой структуры. Вероятно, образованию неожиданного в реакциях галогенлактонизации указанного соединения благоприятствует одновременное скопление в молекуле исходного субстрата нескольких факторов, таких как, торможение вращения вокруг оси N-Ar, присутствие при атоме азота тозильной группы и наличие циклопентенильного фрагмента при орто-положении ароматического кольца (УфИХ РАН, исполнитель: д.х.н., Гатауллин Р. Р.) 20. Найдены новые примеры образования О-изобутильных производных лактолов в процессе низкотемпературного восстановления в хлористом метилене избытком ДИБАГ семичленных лактонов: изоментолактона, β-камфолида, (1R,5R,7S)-5,8,8-триметил-3-оксабицикло[5.1.0]октан-4-она, (1R,5R,7S)-5,8,8-триметил-3-оксабицикло[5.1.0]октан-3-она и лактонов 19β,28-эпокси-2-гидрокси-2,3-секо-18α-олеан-3-овой и 19β,28-эпокси-4S-гидрокси-3,4-секо-24-нор-олеан-3-овой кислот. Показано, что замена кольца F в

		19β,28-эпокси-28-оксо-4-гидрокси-3,4-секо-18α-олеан-3-овой кислоты с тетрагидрофуранового на пентанолидный ведет к образованию единственного стандартного продукта гидридного восстановления. Установлено, что в условиях этой реакции из (-)-7S-ментолактона образуется один эпимер (-)-изобутоксиацеталя, а из 7R-изомера – смесь (1.1:1.0) (2S)- и (2R)-изобутоксиацеталей, что объяснено анализом конформаций исходных ментолактонов квантово-химическим расчётами. Показано, что новая реакция в химии алюминийорганических соединений характерна также для ациклических производных (-)-ментолактона, причем метил 6-гидрокси-3,7-диметилоктаноат ведет себя подобно (-)-ментолактону, а его 6-оксо-аналог – двояко: как (-)-ментолактон и изоментолактон. (УфИХ РАН. Руководитель работы – д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., исполнители – д.х.н. Яковлева М.П., к.х.н. Выдрина В.А., к.х.н. Муслухов Р.Р.) 21. Показано, что [1+1]-конденсация доступных из тетрагидропирана α,ω-дикетонов с дигидразидом эндо,эндо-2,3-норборнандикарбоновой кислоты протекает с образованием макролидов с азинными фрагментами (т.к. в данном случае гидразин является более реакционноспособным, чем дигидрокси-N-аминоимид), тогда как [1+1]-взаимодействие с дигидразидами 5,6-эндо,экзо- и эндо,эндо-дигидроксинорборнандикарбоновых кислот приводит к линейным имидоиминам из-за повышенной реакционной способности N-аминоимида в реакции конденсации с карбонильной функцией. (УфИХ РАН. Руководитель работы – д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., исполнители – д.х.н. Яковлева М.П., д.с.-х.н., к.х.н. Ишмуратова Н.М., к.х.н. Муслухов Р.Р., к.х.н. Вырыпаев Е.М., асп. Шутова М.А.) 22. Обнаружено образование необычных продуктов – (1S,2R,4R)-(додецилсульфонил)- и (1S,2R,4R)-(гексилсульфонил)-1-изопропил-4-метилциклогексанов, 1-((1R,2S,5R)-2-изопропил-5-метилциклогексилсульфонил)бензола – в окислительных превращениях 3-ментеновых сульфидов в системе H2O2–AcOH. На основании квантово-химических расчетов в приближении B3LYP/6-31G(d,p) предложена схема трансформации ненасыщенных 3-ментеновых сульфоксидов в насыщенные сульфоны без участия окислителя. Данная схема подтверждена

		экспериментально: образование насыщенных сульфонов из 3-ментеновых сульфоксидов наблюдается и в водных растворах кислот в отсутствии H2O2. (УфИХ РАН, руководитель работы – д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., исп. – д.х.н. Яковлева М.П., к.х.н. Муслухов Р.Р., д.х.н. Талипов Р.Ф., к.х.н. Тухватшин В.С. 23. Разработан эффективный однореакторный метод получения метиловых эфиров арилоксиуксусных кислот, базирующийся на низкотемпературном озонолизе бензил- и фенилаллиловых эфиров. (УфИХ РАН, руководители работы – д.х.н. Злотский С.С., д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., исп. – к.х.н. Легостаева Ю.В., м.н.с. Гарифуллина Л.Р.) 24. В лаборатории фармакофорных циклических систем УфИХ УФИЦ РАН методом окислительной полимеризации из продукта амино-перегруппировки Кляйзена получен поли-2-(1-метил-2-бутенил)анилин (ПАНИ) и исследованы его электрохимические свойства. Полученный ПАНИ имеет наименьший энергетический уровень ВЗМО, что предопределяет его использование в качестве донорного производного в активном слое при конструировании органических солнечных батарей (УфИХ УФИЦ РАН, руководители работ: д.х.н. Мустафин А.Г., д.х.н. Абдрахманов И.Б.) 25. Разработка полисахаридных ингибиторов гидратобразования для газодобычи. На основе природных полисахаридов и их производных разработаны перспективные экологически безопасные ингибиторы гидратообразования, эффективно работающие в малых дозировках в процессах нефте- и газодобычи. Это создаёт перспективу для замены используемых сегодня токсических реагентов, особенно метанола. На основе природного полисахарида из растительного сырья создан нефтепромысловый реагент, который относится к низкоагрессивным реагентам и по эффективности превосходит в 100–200 раз известные ингибиторы гидратообразования, в 600–800 раз превосходит метанол и диэтиленгликоль, проявляет свойства термодинамических ингибиторов гидратообразования. Разработана методология целенаправленного получения природных углеводов и их производных как путем выделения из растительного сырья, так и синтетических трансформаций. На основе

		производных природных полисахаридов разработаны новые нефтепромысловые реагенты, которые являются высокоэффективными «зелеными» ингибиторами солеотложения и гидратообразования. Предлагаемые реагенты в результате специфической адсорбции на формирующихся гранях образующихся кристаллов ингибируют процессы агрегации, агломерации и солеотложения карбонатов и сульфатов кальция, бария и стронция и приводят к образованию полиморфных кристаллических форм. Обнаружено, что при одновременном воздействии полисахаридов и электромагнитного поля на процесс кристаллизации солей кальция, бария и стронция наблюдается практически важный синергетический эффект, приводящий к образованию наноразмерных кристаллов. (УфИХ РАН, исполнители: д.х.н. Докичев В.А., к.х.н. Киреева Д.Р., асп. Фахреева А.В., асп. Рахимова Н.Т.) 26. Разработаны однореакторные методы синтеза полифункционализированных 1,3-гексагидропиримидинов и 1,2,3,4-тетрагидропиридинов на основе первичных аминов, формальдегида и 1,3-дикарбонильных соединений, первичный скрининг которых на цитотоксическую активность in vitro на клеточных линиях HEK293, Hep G2, Jurkat показал перспективность дальнейшего изучения ряда полученных соединений в качестве противоопухолевых средств. Впервые по типу реакции Манниха в результате четырехкратной конденсации этил 4,4,4-трифторацетоацетата с формальдегидом и гидрохлоридом этилового эфира L-тирозина синтезирована оптически активная ионная жидкость – трифторацетат тетрагидропиримидина. (УфИХ РАН, исполнители: д.х.н. Докичев В.А., к.х.н. Киреева Д.Р., асп. Гибадуллина Н.Н., м.н.с. Бадамшин А.Г.) 27. На основе метилового эфира клопростенола разработан оригинальный переход к новому типу простагландинов - 15-дезокси–Δ12,14–простагландину D, показавшему цитотоксичность в отношении HEK 293, Hep G2 и Jurkat в □M концентрациях. Данный D/J-типа новой топологии простагландин – предшественник соответствующего кросс-сопряженного омега-арилокси PGJ2. (УфИХ РАН. Исполнители: д.х.н. Мифтахов М.С., к.х.н. Востриков Н.С., асп. Лобко И.Ф., д.б.н. Вахитова Ю.В. (ИБГ УФИЦ РАН))

		28. На основе циклопентановых аллилсиланов с боковой активированной C=C-связью разработана новая инициируемая фторид-ионом тандемного типа реакция карбоциклизации с образованием соответствующих производных бицикло[3.1.0]гекс-2-ена. (УфИХ РАН, руководитель: д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Гимазетдинов, асп. Альмухаметов А.З.) 29. Разработан новый синтез биоактивных пирролизидинов one-pot сочетанием аминокислот (глицина), альдегидов и акрилатов по схеме двойного 1,3-диполярного циклоприсоединения. Структура одного из продуктов подтверждена данными рентгеноструктурного анализа. (УфИХ РАН. Руководитель: д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Егоров В.А., д.х.н. Гималова Ф.А., к.х.н. Хасанова Л.С.) 30. В промотируемых SmI2 реакциях (3R,4R)-3-[(1R)-1-(трет-бутилдиметилсилилокси)этил]-4-ацетоксиазетидин-2-она, широко используемого в синтезе карбапенемов, с метилбромпропионатом получены аномальные b-кетоэфирного типа продукты алкилирования. Последние в реакциях NH-алкилирования метилбромацетатом (ТГФ, -78оС, NaHMDS) претерпевали необычное N(1)-C(4)-расщепление лактама с образованием соответствующих ациклических амидов. (Руководитель работ – д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Валиуллина З.Р., к.х.н. Селезнева Н.К., к.х.н. Хасанова Л.С.) 31. В подходах к антибиотикам карбапенемового ряда на примере производного L-метионина продемонстрирован вариант спейсерного связывания аминокислот с бициклическим кором карбапенемов при содействии 2-этокситиоланона, открывающий выход к новой серии модифицированных карбапенемов, содержащих при C(3) амид меркаптоуксусной кислоты. (Руководитель работ – д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Валиуллина З.Р., к.х.н. Селезнева Н.К., к.х.н. Хасанова Л.С., д.х.н. Гималова Ф.А., асп. Галеева А.М.).
7.1	Подробное описание полученных результатов	ИФМК УФИЦ РАН 1. Проведены исследования электрон-акцепторных свойств и диссоциативного захвата электронов

		молекулами биологически активных соединений (лекарственные препараты, витамины, антиоксиданты, яды, пестициды, гормоны, одоранты, индукторы устойчивости растений, радиосенсибилизаторы) методами спектроскопии проходящих электронов и спектроскопии диссоциативного захвата электронов (ДЗЭ). На основе полученных результатов и анализа литературных данных по биологическим эффектам указанных соединений, определена роль резонансного захвата электронов в биохимических процессах, происходящих в клетках живых организмов вблизи цепей переноса электронов в митохондриях и хлоропластах. Кроме того, получены результаты, свидетельствующие о том, что реакции, протекающие в активных центрах некоторых ферментов и мембранных рецепторов, могут быть инициированы захватом электронов на вакантные орбитали молекулы-субстрата. На основе новых оригинальных экспериментальных результатов сформулированы следующие выводы. (а) Исследования ДЗЭ биологически активными соединениями (аскорбиновая кислота, производные салициловой кислоты, противовоспалительные лекарственные препараты) важны для понимания биохимических процессов, происходящих вблизи электрон-транспортных путей в клетках, где возможен захват слабо связанных электронов на межфазных границах (липид-цитозоль-белок) по резонансным механизмам и эффективная диссоциация отрицательных молекулярных ионов (ОМИ), обусловленная ростом фактора выживания в конденсированном состоянии. (б) Токсические эффекты ксенобиотиков с высоким значением сродства к электрону (галогензамещённые гербициды, органические полютанты), превышающим 0.45 эВ – сродство молекулы O2, связаны с захватом электронов дыхательной цепи митохондрий и образованием по механизму ДЗЭ активных радикалов, способных разрушать клеточные мембраны, вызывать мутации ДНК и деактивировать работу ферментов системы цитохрома P450. (в) Антиоксидантная активность полифенольных соединений (флавоноиды и стильбены растительного происхождения, гидроксил-замещённые нафтохиноны) вблизи участков утечки электронов с дыхательной цепи митохондрий описывается специфическим распадом ОМИ с отрывом молекулы водорода и образованием

		хиноидных фрагментов, несущих избыточный электрон, способных стимулировать процесс клеточного дыхания. Разработаны основы приложения результатов исследований резонансного захвата для таких актуальных и перспективных направлений как митохондриальная медицина, адресная доставка лекарственных препаратов, выявление на молекулярном уровне механизмов действия и причин побочных эффектов лекарств, механизмов токсичности и действия антиоксидантов, химия природных соединений. Немаловажны перспективные приложения результатов данной работы в области сельского хозяйства, связанные с механизмами действия гербицидов и индукторов устойчивости растений к стрессовым условиям окружающей среды, включая явление гормезиса. Рассмотрены причины различного действия гербицидов на фотосинтезирующие и дышащие организмы, что чрезвычайно важно в плане употребления в пищу растительных продуктов. Близко к указанным направлениям стоит проблема очистки и восстановления почв от избыточного неконтролируемого применения химикатов с помощью экологически чистых процессов фиторемедиации. Отдельно затронуты вопросы экотоксикологии и глобального транспорта экотоксикантов в биосфере. Тем самым данный результат полностью соответствует приоритетным направлениям Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации (Указ Президента Российской Федерации от 1 декабря 2016 г. №642), а именно в) переход к персонализированной медицине…, г) переход к высокопродуктивному и экологически чистому агро- и аквахозяйству…, ж) возможность эффективного ответа российского общества на большие вызовы… Основные работы по достижению данного результата проведены с использованием уникального научного оборудования ИФМК УФИЦ РАН высококвалифицированными научные сотрудниками Института с высокой эффективностью, что отражается большим числом публикаций в рейтинговых международных изданиях. Публикации: (1) S.A. Pshenichnyuk, A.S. Komolov, Why can unnatural electron acceptors protect photosynthesizing organisms but kill the others? J. Phys. Chem. B 121 (2017) 749-757.

		(2) S.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, D. Jones, E.F. Lazneva, A.S. Komolov, Low-energy electron interaction with melatonin and related compounds, J. Phys. Chem. B 121/16 (2017) 3965-397. (3) S.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, E.F. Lazneva, A.S. Komolov, The role of resonance electron attachment in phytoremediation of halogenated herbicides, J. Phys. Chem. B 120(47) (2016) 12098-12104. (4) S.A. Pshenichnyuk, Y.N. Elkin, N.I. Kulesh, E.F. Lazneva, A.S. Komolov, Low-energy electron interaction with retusin extracted from Maackia amurensis: Towards a molecular mechanism of the biological activity of flavonoids, Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 16805-16812. (5) S.A. Pshenichnyuk, A.S. Komolov, Dissociative electron attachment to resveratrol as a likely pathway for generation of the H2 antioxidant species inside mitochondria, J. Phys. Chem. Lett. 6 (2015) 1104-1110. 2. Полициклические углеводороды используются в органической электронике при создании полупроводниковых устройств и одной из важных характеристик этих объектов является электронное сродство молекул в основном состоянии, от которого зависит их способность захватывать и длительно удерживать электрон с образованием отрицательных ионов в нестабильных состояниях. Другой важной характеристикой является устойчивость отрицательных ионов к процессам фрагментации, которая влияет на срок службы электронных устройств. Отрицательные ионы играют важную роль в реакциях электронного переноса в перспективных материалах органической электроники. Для получения необходимой информации о характеристиках молекулярной системы при ее взаимодействиях с электронами в газовой фазе, то есть, в неосложненных сольватацией условиях, используется масс-спектрометрия резонансного захвата электронов. Одна из методик определения электронного сродства молекул основана на измерении времени жизни молекулярных отрицательных ионов относительно автоотщепления электрона. Многообразие структур полициклических ароматических углеводородов предоставляет для молодых активно развивающихся областей органической электроники и фотоники широкий выбор химически стабильных соединений с необходимыми электронными, оптическими и

		другими физико-химическими характеристиками. Среди молекул-изомеров, состоящих из одинакового числа бензольных колец, линейные молекулы обладают более яркими электроноакцепторными и полупроводниковыми свойствами. Khatymov R.V., Muftakhov M.V., Shchukin P.V. Negative ions, molecular electron affinity and orbital structure of cata-condensed polycyclic aromatic hydrocarbons. // Rapid Commun. Mass Spectrom., 2017.– V. 31. – Pp. 1729–1741. (https://doi.org/10.1002/rcm.7945) 3. Исследования автораспадных состояний отрицательных ионов, образующихся в высоком вакууме в процессах РЗЭ, актуальны, так как, они, вообще говоря, принципиально важны для понимания физических принципов взаимодействия электронов с веществом. Они необходимы также и с точки зрения практики, поскольку отрицательные ионы играют важную роль во многих природных и искусственных физико-химических процессах. В ионосфере и атмосфере Земли они определяют концентрацию свободных электронов, спектр полярных сияний и свечение ночного неба. Отрицательные ионы участвуют в формировании проводящей плазмы – зачатка молнии, действуют в атмосфере Солнца, в радиационно-химических реакциях, в счетчиках Гейгера-Мюллера и электронно-лучевых трубках, в фотосистемах и фотоэлектрических ячейках, используются в химических технологиях. Результаты, полученные в данном случае, существенно расширяют сведения об образовании и свойствах отрицательных ионов сложного электронного строения, которые могут принимать участие в ряде процессов. Вышеприведенные результаты дают сведения о том, что важны не только хорошо известные отрицательные ионы основного электронного состояния, но также электронно-возбужденные, обеспечивают новыми представлениями об энергетике последних, которая в настоящее время изучена недостаточно, указывают на то, что электронно-возбужденные отрицательные ионы могут формироваться при довольны малых энергиях, будучи способными реализоваться там, где их образование считается маловероятным. Полученные результаты могут быть применены в прикладных исследованиях, связанных с современными технологиями в области создания

		новых материалов для молекулярной электроники, при конструировании фотоэлектрических ячеек и запоминающих устройств. 1. O.G. Khvostenko, V.G. Lukin, G.M. Tuimedov, L.Z. Khatymova, R.R. Kinzyabulatov, E.E. Tseplin. Electronically excited negative ion resonant states in chloroethylenes. Electr. Spectr. Rel. Phenom. 2015. – V. 199. – P. 1–9. http://dx.doi.org/10.1016/j.elspec.2014.12.010 2. O.G. Khvostenko, R.R. Kinzyabulatov, L.Z. Khatymova, E.E. Tseplin. The Lowest Triplet of Tetracyanoquinodimethane via UV-vis Absorption Spectroscopy with Br-containing Solvents. J. Phys. Chem. A. 2017, v. 121, p. 7349–7355. http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpca.7b05623 3. Цеплин Е.Е., Цеплина С.Н., Хвостенко О.Г. Специфические эффекты полярного растворителя в спектрах оптического поглощения 1,2-нафтохинона // Оптика и спектроскопия. 2016. – Т. 120. № 2. С. 286-291. // E.E. Tseplin, S.N. Tseplina, O.G. Khvostenko. Specific effects of a polar solvent in optical absorption spectra of 1,2-naphthoquinone // Optics and Spectroscopy. 2016. – V. 120. №. 2. – P.274-279. DOI 10.1134/S0030400X16010203. 4. Органические макромолекулярные и низкомолекулярные материалы в настоящее время являются основой для развития в мире гибкой электроники. В мире большое количество работ направлено на развитие, модификацию и адаптацию известных из физики полупроводников явлений и методов применительно к органическим материалам. На этом пути известны такие успешные проекты, как низкочастотные пленочные транзисторы и сенсоры. Однако специфика органических материалов (слабое межмолекулярное взаимодействие, соответствующее электрон-фононное взаимодействие, склонность к формированию автолокализованных заряженных, спиновых и нейтральных состояний, сопровождающееся изменением энергетического распределения электронов в области запрещенных энергий и многое другое) позволяет ожидать от них большего в плане реализации новых физических явлений и формы проявления известных. Потому второе направление это поиск и реализация новых физических явлений, а также методов достижения новых электронных свойств. По-видимому, к этой части можно отнести достижения в области создания плоских дисплеев на основе органических

		электролюминесцентных светодиодов. Одной из базовых задач органической электроники является создание материалов с высокой до 103 см2/Вс подвижностью носителей заряда и управляемой электропроводностью до 105См. Это возможно только при условии использования новых методологических подходов и методов решения. Что и предложено в рамках данной темы исследования. Полученные результаты имеют важное значение для понимания процессов генерации и транспорта носителей заряда в многослойных гетеростуктурах, созданных на основе органических материалов с большой шириной запрещенной зоны. В полимерных системах типа полиариленфталидов реализуется смешанный электронно-дырочный тип проводимости. В связи с этим особое значение приобретают механизмы возбуждения и рекомбинации экситонных состояний, которые могут определять как уровень проводимости, так и, например, излучательную рекомбинацию (электролюминесценцию) в органическом материале. Большое значение полученные результаты имеют для развития такого направления, как интерфейсный дизайн электронных устройств. В этой связи чрезвычайно важно понимание роли электронной структуры органических диэлектриков при формировании той или иной барьерной структуры на границе раздела металл/полимер при соответствующем положении уровня Ферми металла. Полученные результаты могут найти применение в области создания высокочастотных органических транзисторов, электролюминесцентных источников света. Учитывая малые величины физических воздействий на электронные свойства изучаемых многослойных гетероструктур, можно прогнозировать их использование в тонкопленочной сенсорике (химические сенсоры, физические), в диагностике фазовых и структурных превращений в металлах, а также в спинтронике на основе реализации огромного магнетосопротивления. Полученные результаты имеют мировой приоритет и новизну, так как именно в Институте физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН были впервые обнаружены новые виды электронного переключения в структуре металл/полимер/металл. До этих работ был известен только один тип переключения, вызванный воздействием электрического поля как в полупроводниках, так и диэлектриках. Проведенные исследования показали,

		что инициировать электронное переключение можно значительно более широким спектром воздействий, среди которых можно выделить малые давление, магнитное поле, излучение и температуру. Анализ и сравнение с результатами, опубликованными в мировой научно-технической литературе показывает, что потенциал практического применения полученных научных и научно-технических результатов чрезвычайно высок причем именно с точки зрения реализации приоритетов Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации, утвержденной Указом Президента Российской Федерации от 1 декабря 2016 г. № 642 1. N. V. Vorob'eva, A. N. Lachinov, Yu. I. Latypova. The Effect of the External Magnetic Field on the Wide Band Gap Polymer Conductivity // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2015. V. 28. No. 3. Pp. 757-759. 2. Р.М. Гадиев, А.Н. Лачинов, Д.Д. Карамов, Д.А. Киселев, В.М. Корнилов Влияние толщины нанометровой пленки на свойства ДЭГ вдоль интерфейса полимер/полимер // ЖЭТФ. – 2016. – Т.149. – В.6. –С.1237-1241. 3. I.R.Nabiullin, R.M.Gadiev, A.N. Lachinov Effect of changes in junction potential at the metal1/metal2 interface on the conductivity of a metal1/polymer/metal1/metal2 structure // Materials Science Forum. – 2016. – V.845. – P.21-24. 4. N.V.Vorob'eva, A.N.Lachinov Reversible metal/ dielectric phase transition of metal/polymer structures in magnetic field: tuning the sign of magnetoresistance // Materials Science Forum. – 2016. – V.845. – P.3-6. 5. В.М. Корнилов, А.Н. Лачинов, Д.Д.Карамов, Ю.В. Кульвелис, Надмолекулярная структура тонких пленок электроактивного полимера // ФТТ 2016 Т.58. – В.5. – С. 1030-1035. 5. Актуальность исследования связана с перспективами использования ориентационно – упорядоченных систем (мультиферроиков, НЖК, двухкомпонентных полимерных молекул, магнетиков) в инновационных устройствах информационных технологий, наноэлектронике и спинтронике. Низкоразмерные системы обнаруживают уникальные физические свойства, актуальные для современных технологических приложений в функциональной наноэлектронике. В

		связи с развитием микро- и наноэлектроники магнитные и сегнетоэлектрические материалы становятся незаменимыми компонентами не только в индустрии хранения данных, но и в спинтронике и сенсорной технике. Они вносят новое функциональное качество в микроэлектронику: возможность управления магнитными свойствами материала посредством внешних воздействий (электрических, упругих, оптических). Полученные результаты актуальны для развития физики мультиферроиков и низкоразмерных систем. Разработка механизмов магнитоэлектрических взаимодействий, методики управления солитонными возбуждениями в магнитных и органических материалах, результаты по расчету доменных границ в мультиферроиках, структурных и конформационных переключений в биополимерах, динамике авторезонанса в ортоферритах, низкочастотной динамики скирмионов, процессов рассеяния в системах органических молекул имеют определяющее значение для создания и развития физических основ создания новых функциональных матекриалов, развития информационных технологий, разработки спинтронных и магнонных устройств. 1. Z. Gareeva, O. Dieguez, J. Iniguez, A.K. Zvezdin. Complex domain walls in BiFeO3. Phys.Rev. B (Rapid Communications), v.91, 060404(R) (2015). doi.org/10.1103/PhysRevB.91.060404 2. A.I. Popov, Z.V. Gareeva, A.K. Zvezdin. Magnetoelectricity of domain walls of rare-earth iron garnets. Phys. Rev. B 92, 144420 (2015). doi.org/10.1103/PhysRevB.92.144420 3. A. F. Popkov, N. E. Kulagin, S. V. Soloviov, K. S. Sukmanova, Z. V. Gareeva, and A. K. Zvezdin. Cycloid manipulation by electric field in BiFeO3 films: Coupling between polarization, octahedral rotation, and antiferromagnetic order. Phys. Rev. B 92, 140414(R) (2015). doi.org/10.1103/PhysRevB.92.140414 4. Скалдин О.А., Делев В.А., Шаховцева Е.С., Лебедев Ю.А., Батыршин Э.С. Бризероподобные дефекты и их динамика в одномерной ролловой структуре закрученных нематиков // ЖЭТФ, 2015, Т. 148, вып. 6(12), С. 1232–1247. DOI: 10.1134/S1063776115120158 5. Z.V. Gareeva, K.Y. Guslienko. Magnetic skyrmion dynamics in thin cylindrical dots. Phys.Stat.Sol. RRL// 2016. V. 1- 6 . https://doi.org/10.1002/pssr.201510419 УфИХ УФИЦ РАН

		1. Исследование, связанное с применением полимеров в производстве био- и хемосенсоров, развивается быстрыми темпами. Одним из направлений таких исследований является модификация электродов путем нанесения на их поверхность тонких полимерных пленок, выступающих в качестве разделительных слоев, изменяющих электрический отклик в зависимости от природы адсорбированного на поверхности электрода соединения. Одними из наиболее перспективных полимеров для модификации электродов являются гомо- и сополиариленфталиды, тонкие пленки которых обладают полупроводниковой и металлической проводимостью. Варьируя соотношение блоков различной длины и химического строения можно в широких пределах менять распределение электронной плотности вдоль полимерной цепи и распределение сайтов адсорбции на поверхности электрода. Это открывает возможности с помощью системы «электронный язык» анализировать и идентифицировать лекарственные препараты, определять состав моторных и масел и пищевых продуктов. При изучении электрофизических свойств полученных сополиариленфталидов с терфениленовыми и дифениленоксидными ((TO)n, (TOO)n и (TOOO)n), показана склонность их к избирательной адсорбции различного класса органических низкомолекулярных соединений и продемонстрирована возможность использования их для изготовления хемосенсоров в системах распознавания типа "электронный язык". Модифицированные полиариленфталидами стеклоуглеродные электроды с успехом можно применять для определения бисопролола методом квадратно-волновой вольтамперометрии в лекарственных средствах. Эти электроды можно использовать и в мультисенсорных вольтамперометрических системах типа “электронный язык” для идентификации производимых различными фирмами антиаритмических препаратов, относящихся к β-адреноблокаторам, и выявления контрафактной продукции. Предложенные полимерные модификаторы обладают электропроводностью, имеют малое омическое сопротивление и химически устойчивы. Сенсоры на их основе можно использовать в широком диапазоне pH, в том числе

		для определения бисопролола в физиологических растворах (УфИХ РАН, исполнители: Крайкин В.А., Янгиров Т.А., Сахипова И.И., Гилева Н.Г., Седова Э.А., Ионова И.А.). Публикации: 1) Сидельников А.В., Зильберг Р.А., Яркаева Ю.А., Майстренко В.Н., Крайкин В.А. Вольтамперометрическая идентификация антиаритмических лекарственных средств с использованием метода главных компонент // Журнал аналитической химии. - 2015. - Т.70, №10. - С.1095-1101. 2) Зильберг Р.А., Яркаева Ю.А., Сидельников А.В., Майстренко В.Н., Крайкин В.А., Гилёва Н.Г. Вольтамперометрическое определение бисопролола на модифицированном полиариленфталидами стеклоуглеродном электроде // Журнал аналитической химии. - 2016. - Т. 71, № 9. - С. 964-970. DOI: 10.1134/S1061934816090173. 2. Одной из основных фундаментальных проблем органической химии является изучение механизмов химических процессов, выявление факторов, влияющих на пути их протекания с целью определения оптимальных условий проведения реакции для достижения желаемого результата. Ароматические азиды (ArN3) находят широкое применение в органическом синтезе, в полупроводниковой промышленности в качестве фоторезистов, бессеребряных материалов в фотографии, сшивающих агентов в полимерах. Выяснение механизма фотолиза азидов, в том числе в присутствии кислорода, является актуальной задачей. Фотоокисление арилазидов протекает через промежуточное образование соответствующих нитрозооксидов (ArNOO) которые, наряду с озоном и карбонилоксидами (Ar2COO) являются представителями класса 1,3-диполярных перекисных частиц. Они образуются при взаимодействии триплетных нитренов с молекулярным кислородом. Благодаря частично двойному характеру связи N–O в нитрозооксидном фрагменте ArNOO существуют в виде цис- и транс-изомеров. Ранее было показано, что в отсутствие окисляющихся субстратов мономолекулярная реакция расходования изомерных форм представляет собой трансформацию транс-изомера в цис-изомер, который изомеризуется в ненасыщенный нитрилоксид путем раскрытия ароматического кольца. При наличии в молекуле подходящего реакционного центра нитрилоксиды

		дают азот-содержащие гетероциклические соединения. Новая реакция изомеризации ArNOO была обнаружена, когда в орто-положении по отношению к нитрозоокидной группе ароматического кольца частицы содержится метильный заместитель. Исследования проводились на примере 2-метил-4-[(2E)-1-метилбут-2-ен-1-ил]фенилнитрозооксида. Терминальный атом кислорода цис/син-формы нитрозооксида отрывает Н-атом заместителя с образованием гидропероксинитрена, который далее изомеризуется путем миграции гидроксильного радикала к метиленовой группе в нитрозобензиловый спирт. (УфИХ РАН, Чайникова Е.М., Сафиуллин РЛ.). Публикации: 1) E.M. Chainikova, A.R. Yusupova, S.L. Khursan, A.N. Teregulova, A.N. Lobov, M.F. Abdullin, L.V. Enikeeva, I.M. Gubaydullin, R.L. Safiullin. Interplay of Conformational and Chemical Transformations of Ortho-Substituted Aromatic Nitroso Oxides: Experimental and Theoretical Study // J. Org. Chem. 2017. V.82. №15. P.7750-7763. 2) A.R. Yusupova, R.L. Safiullin, S.L. Khursan. Conformational Transformations in Aromatic Nitroso Oxides. // J. Phys. Chem. A. - 2016. - V. 120. - P. 5693-5705. 3. В настоящее время в офтальмологии актуальным направлением является использование полимерных лекарственных форм (пленок, дренажей, гидрогелей). Коньюгаты даже с известными лекарственными соединениями обеспечивают заметное повышение эффективности их использования за счет улучшения биодоступности, пролонгирования фармакологического действия. Использование в качестве носителей биогенных полимеров, в частности полисахаридов, обеспечивает дополнительное повышение эффекта физиологического действия за счет собственной положительной биологической активности полисахаридов. Полимерные формы эффективны в предоперационных, операционных и послеоперационных мероприятиях в офтальмологии. Глаукома одно из самых распространенных социально значимых заболеваний в офтальмологии. Для торможения процессов пролиферации после антиглаукоматозных операций применяют цитостатики, что сопровождается рядом тяжелых осложнений и нестабильностью гипотензивного эффекта в отдаленные сроки наблюдения. В лаборатории синтеза стереорегулярных

		полимеров для использования при оперативном лечении глаукомы для замены дренажей на основе синтетических полимеров разработан дренаж из гидрогеля на основе модифицированных биогенных биоразлагаемых полимеров - гиалуроновой кислоты и хитозана, содержащий цитостатик - митомицин С и используемый в офтальмологии для поддержания длительного дренажного эффекта при антиглаукоматозных операциях. Варьирование степени модификации биополимеров и условий формирования гидрогеля позволяет регулировать его механическую прочность и скорость выделения митомицина С. Полимерный дренаж обладает высокой биосовместимостью, его использование приводит к уменьшению токсического эффекта цитостатика и стабилизации внутриглазного давления в течение длительного времени после операции. Биорезорбируемость полимеров устраняет необходимость оперативного удаления дренажей. Испытания в Уфимском НИИ глазных болезней показали относительно высокую эффективность (компенсация 62,5%) использования гидрогеля даже при терминальной глаукоме. (УфИХ РАН, исполнители: д.х.н. Колесов С.В., д.х.н. Сигаева Н.Н., м.н.с. Вильданова Р.Р.). Область применения: повышение эффективности оперативного лечения такого социально значимого заболевания как глаукома. Предполагаемые организации внедрения: Уфимский НИИ глазных болезней и офтальмологические клиники республики. Публикации: 1) Бикбов М.М., Хуснитдинов И.И., Сигаева Н.Н., Вильданова Р.Р. Полимерные гели и их применение в офтальмологии // Практическая медицина. - 2017. - Т. 2. - № 9 (110). - С. 38 – 42. 2) Бикбов М.М., Хуснитдинов И.И., Вильданова Р.Р., Остахов С.С., Каюмова Р.Р., Сигаева Н.Н. Гидрогели на основе гиалуроновой кислоты и хитозана в качестве носителя луцентиса при антиглаукомных операциях // Практическая медицина. - 2017. - Т. 1. - № 9 (110). - С. 135 – 138. 3) Патент РФ № 2610407 «Дренаж для лечения глаукомы». Опубл. 09.02.2017. 4) Патент РФ 2610368 «Дренаж для лечения глаукомы». Опубл. 09.02.2017. Лекарственные пленки для профилактики и лечения инфекционных поражений глаз, содержащие антибиотики, дополнительно обладают иммуномодулирующими и мембранотропными свойствами, обеспечиваемыми полимерным носителем. Пленка с дигидрокверцетином

		увеличивает пролонгирующий эффект лекарства в 1,5-2 раза и в значительной степени повышает проникновение препарата в ткани и жидкости глаз, длительно обеспечивая необходимую терапевтическую концентрацию. При использовании лекарственных пленок с левофлоксацином и/или моксифлоксацином концентрация лекарственного соединения в тканях глаза возрастает в 10-14 раз, по сравнению с инстилляционным способом (глазные капли). Проведены клинические испытания разработанных глазных пленок. Рекомендовано их применение для периоперационной профилактики при проведении плановых оперативных вмешательств на глазном яблоке. Введение в клиническую практику данных пленок позволит повысить эффективность профилактики и лечения послеоперационного воспаления без побочного эффекта. Пленки полностью биодеградируемы и неаллергенны. Низкая стоимость компонентов, простота в изготовлении, позволяет без лишних затрат обеспечить офтальмологов высокоэффективным методом профилактики и лечения инфекционных поражений глаз, приводящих нередко к удалению глазного яблока. Разработка защищена патентом РФ № 2404779 от 27.11.10 «Глазная пленка» и патентом РФ № 2581025 от 09.02.2015 «Глазная лекарственная пленка с моксифлоксацином». Имеющийся опыт позволяет разрабатывать технические решения под конкретные медицинские задачи. Разработки направлены на удовлетворение растущих потребностей в доступных и эффективных лекарственных средствах. Потенциал практического применения материалов расширен за счет использования практически доступных полимерных компонентов (ПВС, пектины, гиалуроновая кислота, хитозан) которые уже используются в медицинских отраслях и за счет этого возможно сократить время и затраты на проведение необходимых испытаний при продвижении препаратов на фармакологический рынок. В последние годы полисахариды находят все большее применение для получения различных биологически активных систем, в т.ч. как добавки к пестицидным препаратам. Полисахариды улучшают растворимость пестицидов, понижают их токсичность, повышают биодоступность и биоассимиляцию в объектах окружающей среды.

		Как оригинальный метод модификации природных полисахаридов (арабиногалактана, хитозана, пектина) предложен способ механохимической активации взаимодействия полимеров с некоторыми малорастворимыми пестицидами (хлорсульфуроном, карбендазимом, тирамом) при твердофазной обработке в условиях ударно-сдвигового воздействия. Показана возможность создания твердофазных композиций, обладающих комплексом комбинированного биологического действия, направленного на одновременное увеличение пестицидной активности и повышение урожайности. Выявлена высокая стабильность и гербицидная активность механохимически полученных комплексов хлорсульфурона с полисахаридами (арабиногалактаном, хитозаном и пектином), повышение урожайности культурных растений (овса посевного и пшеницы) на 1,1–1,5 ц/га при снижении нормы расхода хлорсульфурона примерно в 5 – 10 раз. Показано, что комплексы на основе арабиногалактана и хитозана с карбендазимом проявляют фунгицидную активность на уровне свободного препарата при снижении дозы действующего вещества в 5-20 раз. Полученные композиции обеспечивают увеличение стабильности действующих веществ в 1,6 раз и возможности уменьшения действующих концентраций до 10 раз. Публикации: Мударисова Р.Х, Коптяева Е.И., Бадыкова Л.А. Твердофазная модификация хитозана, пектина и арабиногалактана малорастворимым гербицидом хлорсульфуроном // Высокомолек соед. 2017. Б т. 59, № 5. С. 1-8. 4. Мембранное разделение жидкости и газов широко используется в промышленности. В качестве мембранного материала применяют монолитные полимерные пленки, полимерные волокна, в том числе полые. На степень разделения соединений основное влияние оказывают следующие факторы: морфологическое состояние полимеров, химический функциональный состав и, в зависимости от метода разделения, свободный объем и морфология поровой структуры мембраны. В синтезированной серии сополимеров содержащие дифталидные фрагменты с заторможенным вращением C(sp3)-C'(sp3) связи и полиариленфталидные блоки со свободным вращением вокруг C(sp3-C(sp2 связи можно в широких пределах (от пленочной до волокнистой) варьировать морфологическую структуру

		полученных сополимеров, степень кристалличности, температуру плавления, а следовательно, в широких пределах регулировать внутренний объем полимеров. Все это позволяет получать пленочные и волокнистые мембраны, мембранные материалы, имеющие с различной разделительной способностью к разделению полярных и неполярных низкомолекулярных соединений. В лаборатории синтеза функциональных полимеров впервые получены сополиариленфталиды, содержащие в полимерной цепи структуры, построенные по типу присоединения «голова к голове» (ГГ) и «голова к хвосту» (ГХ). Синтезирована серия сополимеров дифенилоксидного ряда с различным соотношением дифталидных ГГ и фталидных ГХ групп. Показано, что введение дифталидных групп приводит к увеличению физико-механических и адгезионных характеристик образующихся сополимеров. При значительном преобладании одной из структур пленки сополимеров изотропные и хрупкие, а при промежуточных соотношениях дифталидных и фталидных групп (1:20-30) – микрофазно-разделенные и прочные. Руководитель работ - В.А. Крайкин; исполнители - Т.А. Янгиров, Э.А. Седова, Н.Г. Гилева, А.А. Фатыхов (Уфимский Институт химии РАН) Публикации: 1) Kraikin V.A., Yangirov T.A., Fatykhov A.A., Ivanova V.P., Sedova E.A., Gileva N.G., Ionova I.A. Polyarylenediphthalides: A new class of phthalide-type polyheteroarylenes // High Performance Polymers. – 2017. – Vol. 29, No. 6. – P. 677-690. 5. Общеизвестна способность различных организмов накапливать металлы, в том числе тяжелые. Большой интерес вызывает изучение данного свойства среди микроорганизмов, входящих в состав пробиотических препаратов и способных оказывать антитоксическое действие вследствие накопления и активного выведения тяжелых металлов из организма. Предположительно, аккумуляция металлов бактериями может осуществляться вследствие образования комплексов тяжелых металлов с аминокислотными остатками белков. Известно, что белки обладают флуоресценцией (ФЛ), которая, в первую очередь, обусловлена излучением триптофана (Trp). Люминесценция Trp исключительно чувствительна к окружению, в том числе, к взаимодействию с

		ионами металлов. Обнаружено, что эффективность влияния ионов тяжелых металлов Pb(II), Co(II), Zn(II), Cd(II) на флюоресценцию триптофана может служить мерой взаимодействия металлов с аминокислотами и, следовательно, опосредованной характеристикой эффективности их биоаккумуляции. Результаты по аккумуляции металлов бактериями рода Bacillus полностью коррелируют с константами тушения ФЛ Trp, которые убывают в ряду Pb(II) > Co(II) ≥ Zn(II) > Cd(II). Полученные результаты позволяют надеяться, что метод тушения ФЛ Trp ионами металлов, отличающийся простотой и высокой чувствительностью, может найти применение при экспресс-оценке способности микроорганизмов накапливать различные металлы. (УфИХ РАН, исполнители: Хурсан С.Л., Остахов С.С., Каюмова Р.Р.). Публикации: 1) Каюмова, Р. Р.; Пешков, С. А.; Остахов, С. С.; Хурсан, С. Л., О связи тушения флуоресценции триптофана ионами тяжелых металлов с эффективностью их биоаккумуляции некоторыми штаммами бактерий рода Bacillus. Химия высоких энергий 2017, 51 (1), 80-82. DOI: 10.1134/S0018143917010040; 2) Peshkov, S. A.; Khursan, S. L., Complexation of the Zn, Co, Cd, and Pb ions by metallothioneins: A QM/MM simulation. Computational and Theoretical Chemistry 2017, 1106, 1-6. 6. Морфинановые алкалоиды, помимо богатого спектра лечебных свойств, являются сильными наркотическими средствами. Это стало поводом для разработки разнообразных методов их аналитической идентификации. Наиболее чувствительные аналитические методы используют флуоресценцию (ФЛ), что делает возможным обнаружение алкалоидов как индивидуально, так и в смесях при малых концентрациях. С другой стороны, такие аминокислоты, как Trp и Tyr, имеют собственную люминесценцию, которая, как правило, определяет ФЛ белков. Эти люминесцентные свойства позволяют предположить возможность оценки эффективности взаимодействия (-)-производных цитизина с функциональными аминокислотами (непосредственно влияющими на ферментативную активность) посредством тушения ФЛ: либо тушение ФЛ ароматических аминокислот (Trp и Tyr) производными цитизина, либо тушение ФЛ

		алкалоидов аргинином и серином, не люминесцентными ациклическими аминокислотами. Эти данные, сопоставленные с результатами молекулярного докинга, дают дополнительную информацию для понимания физико-химических процессов, лежащих в основе биологической активности 3-аминопроизводных 12-N-метилцитизина. Изучены спектрально-флуоресцентные свойства некоторых 3-амино-12-N-производных (-)-цитизина (потенциальных ингибиторов циклооксигеназы-2 (ЦОГ-2)): определены их относительные квантовые выходы и времена жизни в электронно-возбужденном состоянии. Оценена эффективность связывания цитизинов с ЦОГ-2 в лиганд-белковый комплекс по значению констант тушения флуоресценции L-тирозина, L-триптофана, L-серина и L-аргинина – аминокислот, играющих ключевую роль в работе фермента. Показано, что по тушению люминесценции аминокислотных остатков белков триптофана и тирозина 3 аминопроизводными 12-N-метилцитизина может быть оценена эффективность их противовоспалительного действия. (УфИХ РАН, исполнители: Хурсан С.Л., Борисевич С.С., Остахов С.С., Цыпышева И.П., Каюмова Р.Р.). Публикации: Borisevich, S. S.; Kayumova, R. R.; Tsypysheva, I. P.; Ostakhov, S. S.; Khursan, S. L., Luminescent characterization of interaction efficiency between (−)-cytisine and amino acids an indicator of anti-inflammatory of some 12-N-substituted (−)-cytisine derivatives. Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry 2017, 344, 192-198. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2017.04.038. 7. Электрохимические накопители энергии получили широкое распространение в самых разнообразных областях современной техники – мобильных радиоэлектронных устройствах (мобильных телефонах, ноутбуках, планшетах, электроскутерах, электровелосипедах, электромобилях, системах хранения энергии и сглаживания пиковых нагрузок в электросетях). В настоящее время максимальная практическая удельная энергия электрохимических аккумуляторов достигает 250 Вт*час/кг, а суперконденсаторов - 6-8 Вт*час/кг. Для расширения сфер практического применения электрохимических накопителей энергии необходимо увеличить их удельную энергию в 1,5-2,0 раза и снизить стоимость. Для решения этой проблемы необходима разработка

		новых активных материалов для положительных и отрицательных электродов электрохимических накопителей энергии, обладающих высокой удельной энергией, и новых электролитных систем (жидких, полимерных, керамических, стекло-керамических и др.) с высокой удельной электропроводностью в широком температурном диапазоне (-40□+80оС), с высокой анодной стабильностью и термической устойчивостью. Впервые показано, что при электрохимическом восстановлении серы и электрохимическом окислении сульфида лития происходит связывание молекул растворителей, входящих в состав электролитных систем, в результате образования сольватных комплексов полисульфидов лития. Установлено, что состав сольватных комплексов полисульфидов лития определяет минимальное количество электролита, необходимое для максимального использования серы при заряде и разряде литий-серных аккумуляторов. Весовое соотношение электролит : сера является основным фактором, определяющим удельную энергию литий-серных аккумуляторов. .Исследования частично выполнены при поддержке РФФИ, Проект № 14-29-04032 «Разработка новых электродных материалов на основе комплексных соединений полисульфидов лития для аккумуляторов с высокой плотностью энергии». Изучен механизм электрохимического восстановления серы и полисульфидов лития в апротонных электролитных системах и влияние степени полисульфидности (количества атомов серы в полисульфидном анионе) на электрохимическую активность полисульфидов лития. Показано, что вне зависимости от степени полисульфидности все полисульфиды лития (Li2S8-Li2S2) обладают электрохимической активностью. Электрохимическая активность полисульфидов лития снижается по мере уменьшения количества атомов серы в полисульфидном анионе. Исследования частично выполнены при поддержке РФФИ, Проект № 14-29-04032 «Разработка новых электродных материалов на основе комплексных соединений полисульфидов лития для аккумуляторов с высокой плотностью энергии». Методами электрохимической дилатометрии, электрохимической импедансной спектроскопии и электрохимической калориметрии установлено, что при заряде литий-серных аккумуляторных ячеек на отрицательном электроде происходит образование

		мелкодисперсных осадков металлического лития, обладающих высокой химической активностью по отношению к сере и высшим полисульфидам лития. Впервые показано, что интенсивное тепловыделение, наблюдаемое при заряде и разряде литий-серных ячеек, обусловлено взаимодействием мелкодисперсного металлического лития с растворенными в электролите серой и полисульфидами лития. Исследования частично выполнены при поддержке Британского Совета, British Council grant under Research Links and Newton Fund «Electrochemistry of lithium electrodes in the electrolyte systems for lithium-sulphur batteries». Впервые изучены тепловые эффекты процессов, протекающих в литий-серных аккумуляторах при их заряде, разряде и хранении, а также оценены термодинамические параметры реакций электрохимического восстановления серы и полисульфидов лития. Установлено, что электрохимическое окисление сульфида лития и полисульфидов лития является эндотермическими процессами, а электрохимическое восстановление серы и полисульфидов лития – экзотермическими процессами. Показано, что нейтральная сера и высшие полисульфиды лития (Li2Sn, n>=6) обладают большей реакционной способностью по отношению к металлическому литию, чем средние и низшие полисульфиды лития (Li2Sn, n<6). Обнаружено, что повышение температуры электрохимического восстановления серы и полисульфидов лития приводит к увеличению тепловых эффектов. Увеличение скорости электрохимических процессов восстановления и окисления соединений серы (плотности тока катодной и анодной поляризации) в литий-серных аккумуляторах интенсифицирует коррозионные процессы. Исследования частично выполнены при поддержке РФФИ, Проект № 14-03-31399 «Термодинамика электрохимических процессов в системе литий-сера». Полученные результаты могут быть использованы при разработке аккумуляторов на основе электрохимической системы литий-сера и новых типов энергоемких электрохимических накопителей энергии для применения на электротранспортных средствах и системах резервирования электрической энергии. (УфИХ РАН, исполнители: Колосницын В.С., Кузьмина Е.В., Нургалиев А.Р., Мочалов С.Э., Карасева Е.В., Иванов А.Л.). Публикации: 1) Почему количество электролита

		влияет на характеристики литий-серных ячеек / Колосницын В.С., Карасева Е.В., Кузьмина Е.В., Иванов А.Л. // Электрохимия. - 2016. - Т. 52, № 3. - С. 315-325, DOI: 10.1134/S1023193516030071. 2) On the reasons for low sulphur utilization in the lithium–sulphur batteries / V.S. Kolosnitsyn, E.V. Kuzmina, E.V. Karaseva / Journal of Power Sources 274 (2015) 203-210, 3) Электрохимический калориметр теплового потока / Мочалов С.Э., Нургалиев А.Р., Антипин А.В., Кузьмина Е.В., Колосницын В.С. // Электрохимия. - 2016. - Т. 52, № 5. - С. 506-513. 4) Калориметр теплового потока для исследования химических источников тока / Мочалов С.Э., Нургалиев А.Р., Кузьмина Е. В., Колосницын В.С. // Научное приборостроение. – 2015. Т. 25, № 2. - С. 45-52. 8. Известно, что кислотно-основные и окислительно-восстановительные свойства производных урацила в растворах зависят от природы заместителей при двойной связи пиримидинового кольца. Показано, что наличие гидроксильной группы в пятом положении может приводить к окислению 5-гидрокси-6-метилурацила молекулярным кислородом в щелочных водных растворах с образованием ряда промежуточных (5,5,6-тригидрокси-6-метилпиримидин-2,4-диона, 4-гидрокси-6-метилпиримидин-2,5-диона) и конечных (оксалат натрия, ацетонитрил, ацетамид) продуктов реакции. Показано, что необходимым условием для протекания реакции является диссоциация молекулы с отрывом протона от гидроксильной группы. Впервые определены константы и термодинамические характеристики кислотно-основного равновесия синтезированных N- и O-метилпроизводных 5-гидрокси-6-метилурацила (5-метокси-3,6-диметилурацила, 5-метокси-1,6 диметилурацила и 5-метокси-6-метилурацила) и 6-метилурацила (5,6-диметилурацила и 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацила) в водных щелочных растворах. Предложена методика определения соотношения анионных форм производных урацила в щелочных, водных и диметилсульфоксидных растворах с использованием модельных N- и O-метилированных производных. (УфИХ РАН, исполнители: Иванов С.П., Петрова С.Ф., Абдрахимова Г.С., Нугуманов Т.Р., Хурсан С.Л., Муринов Ю.И., Остахов С.С.) Методами двумерной корреляционной ЯМР спектроскопии установлены структуры аддуктов

		Дильса-Альдера 2-оксо- и 4-оксо- N-Me производных (-)цитизина с N-замещенными малеимидами. По данным NOESY спектров найдено, что в термических условиях протекания реакции для 2-оксо производного из четырех возможных стереоизомеров образуется единственный β-endo изомер, тогда как для 4-оксо производных наблюдается образование □-endo и β-endo стереоизомеров. По данным NOESY спектров для α-endo стереоизомеров наблюдаются следующие NOE: H-13/Hsyn-15; H-12b/Hendo-11. Для β-endo стереоизомеров наблюдаются H-12b/Hsyn-15; H-13/H-12 и H-13/Hendo-11 NOESY кросс-пики. Методом кинетической ЯМР 1H спектроскопии исследованы особенности протекания данной реакции в условиях кипячения в дейтеротолуоле. (УфИХ РАН, исполнители: Лобов А.Н., Цыпышева И.П., Петрова П.Р.). Публикации: 1) Ilyina M.G., Khamitov E.M., Ivanov S.P., Khursan S.L. Anions of uracils: N1 or N3? That is the question // Computational and Theoretical Chemistry, 2016, V. 1078. P. 81-87. 2). Остахов С.С., Хурсан С.Л., Муринов Ю.И., Нугуманов Т.Р., Каюмова Р.Р., Петрова С.Ф. О роли меди (II) в реакциях окисления молекулярным кислородом 5-гидрокси-6-метилурацила в основном и электронно-возбужденном состоянии в водных растворах // Химия высоких энергий, 2017. Т.51. №1. С. 36-41. 9. Синтезировано более 50 производных урацила, которые полностью охарактеризованы методами 1H, 13C, 15N ЯМР спектроскопии и переданы на испытания. Предложена фармацевтическая композиции на основе 1,3-диметил-5-карбоксиурацила и глицирризиновой кислоты, обладающая стимулирующим действием на репаративную регенерацию эпителиальной, нервной и костной тканей, превосходящая по эффективности препарат Ксимедон. Впервые получены данные о возможности фармакологической стимуляции образования костного матрикса. Лекарственная композиция стимулирует репаративную регенерацию, ускоряет синтез нуклеиновых кислот и белков, способствует делению клеток, повышает активность нейтрофилов и макрофагов, стимулирует антителообразование и лекопоэз. Экспериментальное исследование по изучению влияния лекарственной композиции на регенерацию эпителиальной и нервной тканей проводили на

		белых крысах-самцах массой 180-200 г, на регенерацию костной ткани – на кроликах, массой 2,8-3,0 кг и козах массой 30,0 кг. Критериями оценки эффективности регенерации костной ткани являлись: рентгенологическое исследование; иммуногистохимическое исследование с использованием антител кCD68 - маркёр остеокластов, Ki67 – пролиферирующих клеток; морфометрическая оценка заполнения дефекта зрелой костной тканью. Определен механизм действия композиции на репаративную регенерацию тканей. Стимулирующий эффект на регенерацию эпидермиса кожи опосредован усилением экспрессии P2Y12 и P2X1 в кератиноцитах, на посттравматическую регенерацию периферического нерва – стимуляцией в чувствительных нейронах экспрессии P2Y6 рецепторов. Выраженный стимулирующий эффект лекарственной композиции на посттравматическую регенерацию костной ткани опосредован усилением пролиферации и дифференцировки остеогенных клеток. Предложенная лекарственная композиция стимулирует репаративную регенерацию, ускоряет синтез нуклеиновых кислот и белков, способствует делению клеток, повышает активность нейтрофилов и макрофагов, стимулирует антителообразование и лекопоэз. Работа выполнена по Проекту РНФ № 16-15-00141: Создание стимуляторов посттравматической регенерации тканей на основе производных пиримидин-4-она для разработки отечественного инновационного лекарственного препарата. Публикации: 1) Grabovskiy S.A., Kabal`nova N.N., Andriayshina N.M., Egorov V.I., Valiullin L.R., Nabatov A.A., Raginov I.S., MurinovYu.I. The Impact of 5-Substituted Uracil Derivatives on Immortalized Embryo Lung Cells. // Letters in Drug Design & Discovery. – 2017. – V.14. – № 12, P. 1409 – 1414. 2) Голубятникова Л.Г., Хисамутдинов Р.А., Грабовский С.А., Кабальнова Н.Н., Муринов Ю.И. Комплексообразование палладия(II) и платины(II) с 6-трет-бутил-2-тиоурацилом // Журнал общей химии. – 2017. – Т. 87. – Вып. 1. – С 123-127. 10. Показано, что фиксация и активация молекулярного кислорода происходит на шестикоординационных комплексах иона меди(II) и 5-амино- и 5-гидроксипроизводных урацила. На примере 5,6-диамино-1,3-диметилурацила, 5-

		аминоурацила и 5-аминооротовой кислоты наблюдается влияние строения лиганда на скорость окисления производных урацила молекулярным кислородом в водных растворах в присутствии ионов меди(II). Начальная скорость окисления 5,6-диамино-1,3-диметилурацила, 5-аминоурацила и 5-аминооротовой кислоты равна 5.47•10–6, 7.95•10–7, 4.37•10–8 моль/(л*с) соответственно. Сделан вывод, что стадия комплексообразования производных 5-аминоурацила с ионами меди(II) в реакции окисления молекулярным кислородом в водных растворах является определяющей и зависит от донорных свойств и редокс-потенциала лиганда. Электронодонорный заместитель в шестом положении урацильного кольца увеличивает скорость окисления лиганда, а электроноакцепторный уменьшает. Идентифицированы продукты окисления и предложен механизм активации молекулярного кислорода на комплексах производных урацила с ионами меди(II). Установлено, что образование активных форм кислорода и окисление производных урацила происходит только во внутренней координационной сфере октаэдрических комплексов в присутствии воды. Определен состав комплексов и донорные центры лигандов, участвующие в комплексообразовании с ионами меди(II). Полученные результаты моделируют ферментативные процессы в живых организмах и объясняют прооксидантные свойства лекарственных препаратов на основе производных урацила. Синтезирован ряд N-метилированных производных урацила (1,3-диметилурцил, 1,3-диметил 5-гидроксиурацил, 1,3-диметил 5-аминоурацил, 1,3,6-триметилурацил, 1,3,6-триметил-5-аминоурацил, 1,3,6-триметил-5-гидроксиурацил, 1,3-диметил-6-фенилурацил, 1,3-диметил-6-фенил-5-гидроксиурацил), растворимых в неполярных растворителях, и впервые изучены их антиоксидантные свойства, используя надежный метод инициированного окисления стирола в хлорбензоле. Метод SMD-M05/MG3S использовали для предсказания реакционной способности изученных соединений по отношению к пероксильным радикалам. Установлено влияние строения на реакционную способность, эффективность ингибирования и механизм реакции. В случае изученных производных урацила нет удовлетворительной корреляции между константой скорости реакции с пероксидьными радикаламии и

		величиной энергией диссоциации связи (BDE) или потенциалом ионизации (IP). Хорошо согласуется с экспериментально полученными данными энтальпия переходного состояния, рассчитанная на уровне теории SMD-M05/MG3S. Производные урацила в неполярном растворителе характеризуются как ингибиторы средней реакционной способности. Константы скорости ингибирования не превышают значения 1•105 М–1□с–1. Показано, что некоторые 5-аминопроизводные урацила при взаимодействии с пероксильными радикалами генерируют супероксид анион радикал, как пиримидины, вызывающие фовизм. Публикации:1) S. A. Grabovskiy, A. V. Antipin, Y.S. Grabovskaya, N. M. Andriayshina, N.N. Kabal'nova. Effect of the Methyl Group on Peroxyl Radical Trapping by 5-Hydroxy- and 5-Amino-Derivatives of 1,3-Dimethyluracil // Lett. Org. Chem. –2017. – V.14. – №10. – P.24-32. 2) Мишинкин В.Ю., Грабовский С.А., Кабальнова Н.Н., Муринов Ю.И. Комплексообразование 5-аминооротовой кислоты с ионами меди(II) в растворе ДМСО // Журн. общей химии. – 2015. – Т. 85. – Вып. 7. – С. 1166 – 1171. 3) Акчурина О.В., Мишинкин В.Ю., Грабовский С.А., Кабальнова Н.Н., Муринов Ю.И. Протонирование 5-аминоурацила, 5-амино-1,3,6-триметилурацила и 6-аминоурацила в водных растворах. // Журн. общей химии. – 2016. – Т. 86. – № 10. – С. 1691 – 1696. 4). Муринов Ю.И., Мишинкин В.Ю., Акчурина О.В., Грабовский С.А., Кабальнова Н.Н. Окисление 5-аминоурацила молекулярным кислородом в присутствии хлорида меди(II) в водном растворе. // Журнал общей химии. – 2017. – Т. 87. – Вып. 8. – С. 1252 – 1259. 5). Мишинкин В.Ю., Грабовский С.А., Кабальнова Н.Н., Муринов Ю.И. Активация молекулярного кислорода на комплексах меди(II) с 5-гидрокси- и 5-аминооротовой кислотами. // Журнал общей химии. – 2017. – Т.87. – Вып. 7. – С. 1149-1153. 11. Для создания схем и оптимизации технологических процессов экстракционного извлечения, концентрирования и разделения цветных, редких и благородных металлов с применением новых эффективных и селективных серо- и азотсодержащих реагентов при комплексной переработке бедных руд и техногенных отходов разработан способ доизвлечения и концентрирования палладия(II) из «бедного»

		раствора аффинажа экстракцией производными 1Н-1,2,4-триазола. Установлено, что палладий(II) извлекается количественно из 1 моль/л солянокислых растворов и в оптимальных условиях селективно отделяется от платины(IV) и родия(III). После отделения палладия в рафинате остаются платина и родий. Платина может быть доизвлечена по классической схеме экстракцией трибутилфосфатом, а растворы родия сконцентрированы. Несмотря на решение узкой, конкретной задачи в рамках технологического передела МПГ, результаты показывают возможность переработки больших по объему и бедных по содержанию производственных растворов, полученных из вторичных ресурсов, и позволяют совершенствовать процесс аффинажа Изучена экстракция неодима(III) из хлоридных растворов с использованием нового экстрагента - смеси диацилированных диэтилентриаминов (DAD) и фракции α,α'-разветвленных карбоновых кислот (HA) в толуоле. В равновесном диапазоне pH от 5,5 до 6.5 определен состав экстрагированного комплекса Nd(III) в виде [Nd(OH)A2•DAD] и предложен механизм экстракции. Предложен новый слабоосновной комплексообразующий реагент – 4-[(гексилсульфанил)метил]-3,5-диметил-1Н-пиразол (разбавитель хлороформ) для извлечения палладия(II) из солянокислых растворов. Установлено, что палладий(II) с высокой эффективностью извлекается из растворов 0.1-3 моль/л HCl (DPd ~ 103) и может быть селективно отделен от платины(IV) (DPt = 0.04-0.31), меди(II) (DCu = 0.0-0.09), а также от никеля(II) и железа(III), не экстрагирующихся в данных условиях. Показано, что палладий(II) за 5 мин полностью (> 99.9%) реэкстрагируется раствором тиомочевины в 0.1 моль/л HCl при B:O = 1:1, что позволяет использовать экстрагент в циклическом режиме «экстракция – реэкстракция». Публикации: 1) Афзалетдинова Н.Г., Хисамутдинов Р.А., Бондарева С.О., Муринов Ю.И. Экстракция родия(III) из солянокислых растворов дигидрохлоридомбис-ацилированноготриэтилентетрамина. // Журн. общей химии. – 2015. – Т. 85. – Вып. 8. – С. 1380 – 1384. 2) Хисамутдинов Р.А., Анпилогова Г.Р., Шитикова О.В., Муринов Ю.И. Хлорокомплексы платины(II) и платины(IV) с (RS)-1-(4-хлорфенил)-4,4-диметил-3-(1Н-1,2,4-триазол-1-ил-метил)-

		пентан-3-олом. // Журн. неорган. химии. – 2016. – Т.61. – № 12. – С. 1591 – 1598. 3) Голубятникова Л.Г., Хисамутдинов Р.А., Грабовский С.А., Кабальнова Н.Н., Муринов Ю.И. Комплексообразование палладия(II) и платины(II) с 6-трет-бутил-2-тиоурацилом. // Журнал общей химии. – 2017. – Т. 87. – Вып. 1. – С 123-127. 4). Bondareva S.O., Spirikhin L.V., Lobov A.N., Murinov Yu. I. Solvent extraction of neodymium(III) from chloride solutions using a mixture of diacylated diethylenetriamines and carboxylic acids. // Solvent extraction and ion exchange – 2017. – V.35 – No5. – P. 332 – 344. 12. Полицентровые катализаторы Циглера-Натта занимают лидирующие позиции в промышленном синтезе стереорегулярных каучуков. Формирование образца полимера одновременно на нескольких типах активных центров увеличивает разброс параметров, характеризующих его молекулярную структуру и эксплуатационные свойства. В производственных масштабах это значительно усложняет получение полидиенов с точно заданными потребительскими свойствами в экономически выходных условиях. Это связано с тем, что используемые технологии приготовления классических катализаторов Циглера-Натта не позволяют контролировать баланс между отдельными типами активных центров. Разработка методов, позволяющих регулировать число типов активных центров классических катализаторов Циглера-Натта, представляет значительный фундаментальный интерес, поскольку требует получения новых знаний о различных аспектах механизма стереоспецифической полимеризации. Если такие методы не увеличат себестоимость катализатора, то они могут рассматриваться как перспективные для практики средства получения усовершенствованных катализаторов, в которых сочетаются низкая себестоимость исходных компонентов и улучшенные каталитические свойства. В УфИХ РАН разработан метод получения одноцентрового неодимового катализатора для полимеризации изопрена, который был внедрен в производство каучука марки СКИ-5 (ОАО Синтез-Каучук, г. Стерлитамак). По сравнению с титановым, неодимовый катализатор характеризуется более мелкими частицами и узким распределением в диапазоне диаметров от 0,05 до

		2,1 мкм. Показано, что распределение частиц по диаметру неодимового катализатора определяется дисперсностью частиц исходного спиртового комплекса хлорида неодима, который формируется на стадии взаимодействия хлорида неодима (III) с изопропиловым спиртом. Установлено, что размер частиц NdCl3×nИПС определяется величиной n. В процессе синтеза сольвата происходит увеличение n до определенного предела, который меньше, чем исходное значение ИПС в реакционной смеси (ИПС/Nd=3). Процесс сольватации при обычном перемешивании, характеризуется формированием суспензии с широким распределением диаметров частиц, в которых содержание ИПС также меняется в широких пределах. Однако при гидродинамическом воздействии в турбулентных потоках на стадии формирования реакционной смеси размер частиц NdCl3×nИПС снижается и не зависит от продолжительности синтеза. При этом содержание ИПС в комплексе повышается и максимально приближается к исходному, т.е. к n→3. Взаимодействие NdCl3×nИПС с ТИБА и пипериленом характеризуется укрупнением частиц неодимового катализатора. При синтезе катализатора на основе суспензий сольватов, полученных при гидродинамическом воздействии на реакционную смесь, происходит формирование неодимового катализатора с более узким распределением частиц по размерам, чего невозможно достичь при обычном перемешивании. Для неодимового катализатора NdCl3×nИПС–ТИБА–ПП (каучук СКИ-5) многократное воздействие в турбулентных потоках осуществляется при получении спиртового комплекса NdCl3×nИПС. Способ позволяет снизить диаметр частиц спиртового комплекса с 0,17 мкм до 0,087 мкм, увеличить содержание изопропилового спирта в комплексе с 2,3 до 2,9, синтезировать полиизопрен с высокими молекулярными массами и узким молекулярно-массовым распределением Mw/Mn = 2,1–2,6. Публикации: 1) Захаров В.П., Мингалеев В.З., Берлин А.А., Насыров И.Ш., Жаворонков Д.А., Захарова Е.М. Кинетическая неоднородность титановых и неодимовых катализаторов производства 1,4-цис-полиизопрена // Химическая физика. 2015. Т. 34, №3. С.69-75., 2) Mingaleev V.Z., Zakharova E.M., Zakharov V.P. Microheterogeneous Nd-Based Ziegler-Natta Catalyst: New Way of Increase Activity // In book «Chemical and biochemical

		engineering: new materials and developed components». Ed. by A. Pourhashemi. Appl Academic Press: Toronto, New Jersey. ISBN 978-1-77188-030-5. 2015. P. 103-111 (SCOPUS). 13. В синтезе энантиомерно чистых простагландинов важную роль играют хиральные, соответствующим образом функционализированные блок-синтоны. Одним из таких важных синтонов для простагландинов является лактон Кори. В лаборатории синтеза низкомолекулярных биорегуляторов разработан практичный телескопический вариант получения синтетически важных лактондиола и эпоксилактона Кори и их энантиомеров в две стадии с общим выходом 40% исходя из легкодоступных хиральных карбоксамидов, синтезированных на основе аддукта циклопентадиена и дихлоркетена и R-(+)-альфа-метилбензиламина и разделенных колоночной хроматографией на SiO2. (УфИХ УФИЦ РАН, руководитель работ – д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Валиуллина З.Р., к.х.н. Иванова Н.А., асп. Ахметьянова В.А.) Публикации: 1) Zuleykha R. Valiullina, Vera A. Akhmetyanova, Nadezhda A. Ivanova, Mansur S. Miftakhov. Tandem transformations of cyclopentene α,α-dichlorcarboxamides into epoxy lactones induced by a gamma-hydroxyl group; a short synthesis of the Corey epoxy lactone and its enantiomer // Tetrahedron Lett. - 2015. - V. 56. - No. 49 - P. 6904–6907. 2) Валиуллина, З.Р. Галогениминолактонизация циклопентеновых α,α-дихлоркарбоксамидов. тандемная перегруппировка иминолактонов в эпоксилактоны / Валиуллина З.Р., Ахметьянова В.А., Иванова Н.А., Ерастов А.С., Мещерякова Е.С., Мифтахов М.С. // Журн. орг. химии. - 2015. - Т. 51. - Вып. 11. - С. 1523–1530. 14. Саркодиктиины А, В и элеутеробин структурно родственны и обладают одним и тем же механизмом цитотоксического действия, подобным таксолу и эпотилонам. Полные синтезы этих соединений позволили получить важную информацию относительно зависимости структура – активность. Комбинаторная библиотека саркодиктиинов, к сожалению, не учитывает влияние цикла А на биологическую активность элеутезидов. Выявление этой зависимости перспективно в плане синтеза доступных и эффективных аналогов элеутезидов. Поэтому синтез аналогов элеутезидов с

		модифицированным циклом А с целью изучения взаимосвязи структура-активность является актуальной задачей. На основе аддукта Дильса-Альдера левоглюкозенона и пиперилена разработана схема 26-стадийного химического синтеза аналога "морского" цитотоксического саркодиктиина А с 14-метилциклогексеновым циклом А, ключевой стадией которой является внутримолекулярная ацетилен-альдегидная конденсация боковых цепей при метилциклогексеновом ядре в 10-членный карбоцикл. Таким образом, впервые получены аналоги элеутезидов с модифицированным циклом А. Предлагаемый ряд позволит установить зависимость цитотоксической активности от строения и выявить более доступные аналоги при сохранении цитотоксической активности. (УфИХ РАН, исполнители: д.х.н. Валеев Ф.А., к.х.н. Шарипов Б.Т., асп. Першин А.А.) Публикации: 1) Давыдова А.Н., Шарипов Б.Т., Валеев Ф.А. Элеутезиды и их аналоги IX. Синтез С3-С8 элеутезидного блока из левоглюкозенона // ЖОрХ. - 2015. - Т.51. – Выпуск 10. – С. 1440-1448. 2) Шарипов Б.Т., Першин А.А., Салихов Ш.М., Валеев Ф.А. Элеутезиды и их аналоги XI. Заключительный этап синтеза аналога саркодиктиина А с 14-метилциклогекс-12-еновым циклом А // ЖОрХ. 2016. Т.52. С. 732-736. 3) Шарипов Б.Т., Першин А.А., Салихов Ш.М., Валеев Ф.А. Элеутезиды и их аналоги XII. Альтернативная внутримолекулярная кетализация с образованием трициклического ядра 4,8-оксаэуницелланового типа // ЖОрХ. 2016. Т.52. С. 985-988. 4) Першин А.А., Шарипов Б.Т., Валеев Ф.А. Гликозилирование элеутезидного ядра 2-О-ацетил-3,4-О-изопропилиден-D-арабинопиранозой // Бутлеровские сообщения. - 2016. - Т.45. - №3. - С.1-5. 15. Обеспечение энантиоспецифичности синтетических подходов к фармакологически ценным объектам является актуальным и перспективным направлением органической и медицинской химии. Здесь важны простота, практичность и атом-экономичность стадий и наличие оригинальных переходов и реакций, обеспечивающих эффективность синтетического подхода в целом. Вышесказанное продемонстрировано на примере карбануклеозида

		Энтекавира. Исходя из хирального лактондиола Кори разработана оригинальная схема синтеза высокоактивного против вируса гепатита В карбануклеозида Энтекавира (ED50 = 3 nM). Эффективность подхода обеспечивается получением из (+)-лактондиола Кори в "one-pot" процедуре гидроксиблокированных производных циклопентилуксусной кислоты и далее ключевого (+)-экзометиленциклопентанового блока для Энтекавира. Суммарный выход (+)-Энтекавира из (+)-лактона составляет ~10%. (УфИХ УФИЦ РАН, руководитель д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Востриков Н.С., к.х.н. Валиуллина З.Р., к.х.н. Иванова Н.А., асп. Лобко И.Ф., асп. Ахметьянова В.А.) Публикации: 1) Valiullina Z.R., Akhmet'yanova V.A., Vostrikov N.S., Miftakhov M.S. A short synthesis of the carbocyclic core of Entecavir from Corey lactone. // Mendeleev Communications. – 2016. – V. 26. – P. 9-11. 2) Востриков Н.С., Лобко И.Ф. Мифтахов М.С. Новый синтез (+)–энтекавира / Материалы IX Всероссийской научной интернет-конференции "Интеграция науки и высшего образования в области био- и органической химии и биотехнологии", г. Уфа, 2016. - С. 69. 16. Дитерпеновый алкалоид лаппаконитин один из наиболее распространенных алкалоидов в природе является основой отечественного, высокоэффективного, антиаритмического лекарственного препарата «Аллапинин» применяемого в медицинской практике. Однако, последний, обладает рядом побочных нежелательных действий, что требует поиск путей его модификации с целью получения нового лекарственного средства, по эффективности не уступающего Аллапинину, но не обладающего нежелательными побочными эффектами. Отработанный нами ранее удобный одностадийный метод получения нитрона на основе лаппаконитина позволяет получать новый широкий ряд гибридных структур и дает возможность использовать синтетический потенциал изоксазолидинов как синтонов, открывая путь к большому числу потенциально биологически активных соединений, имеющих новый тип связи с С-19. Сведения о гибридных структурах дитерпеновых и нордитерпеновых алкалоидов по связи N(20)-C(19) как природного, так и полусинтетического

		происхождения, пути их получения, дальнейших трансформациях и фармакологическом действии в литературе не описаны. . (Уфимский Институт химии, руководитель работ - академик М.С.Юнусов; исп. - к.х.н. Е.М. Цырлина, к.х.н. Т.М. Габбасов). Публикации: 1) Tsyrlina E.M., Gabbasov T.M., Spirikhin L.V., Yunusov M.S. Isoxazolidine derivatives of lappaconitine and talatisamine // Chemistry of Natural Compounds. - 2018. –V. 54. - № 3. – P. 515-519. 2) Gabbasov T.M., Tsyrlina E.M., Spirikhin L.V., Yunusov M.S. Reaction of lappaconitine nitrone with allylamines // Chemistry of Natural Compounds. - 2018. – V. 54. - № 6. – P. 1205–1207. DOI: 10.1007/s10600-018-2598-2 17. Как известно, лактоны среднего и большого размеров обладают самой разнообразной биологической активностью, определяемой числом и природой заместителей в различных положениях лактонного цикла. Характерной особенностью нативных лактонов является наличие алкильного или гетероатомного заместителя в ω-положении. Например, в форакантолиде при отсутствии других заместителей в ω-положении находится метильная группа. Этот деканолид может служить в определенном смысле реперной структурой для оценки вклада того или иного заместителя в соотношение структура-активность в данном ряду биологически активных соединений. Поэтому синтез нативных лактонов среднего и большого размеров циклов А на основе аддуктов Михаэля левоглюкозенона и циклоалканонов, исключающий методы высокого разбавления, является актуальной задачей. В лаборатории фармакофорных циклических систем впервые синтезирован новый лактон, являющийся аналогом форакантолида, аннелированного углеводным остатком. Изучение биологической активности позволит определить вклад углеводного остатка в соотношение структура–активность; полученные данные определят направление дальнейшей модификации углеводного фрагмента полученного деканолида. (Руководитель работ - д.х.н. Ф.А.Валеев; исполнители: к.х.н. Л.Х.Файзуллина, к.х.н. Ю.А.Халилова, Уфимский Институт химии). Публикации: 1) Галимова Ю.С., Тагиров А.Р., Файзуллина Л.Х., Салихов Ш.М., Валеев Ф.А. Дифференциация кетогрупп в аддуктах Михаэля левоглюкозенона и циклогексанона // ЖОрХ. 2017.

		Т.53. С. 377-383. 18. Среди большого числа известных вторичных природных метаболитов лишь небольшая часть имеет макроциклическое строение. Среди них выявлены соединения, обладающие мощными антимикробным, противовирусным, противопаразитарным и противоопухолевым действиями. Кроме того, макроциклы, содержащие в своем составе сложноэфирные и азотсодержащие (гидразидные, азинные и др.) фрагменты, нашли широкое применение в координационной химии как лиганды, в биомедицине, экстракции и катализе. Продукт окисления фармакологически активного касторового масла, промышленно доступного из семян клещевины обыкновенной Ricinus communis – глицерил три-(12-оксо-9Z-октадеканоат), нами впервые применен в качестве платформы для синтеза макрогетероцикла с фармакофорными (азинной и гидразонной) группами (УфИХ РАН, д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., д.х.н. Яковлева М.П., к.х.н. Выдрина В.А., к.х.н. Рублева М.А., д.с.-х.н. Ишмуратова Н.М., член-корр. РАН Толстиков А.Г.). Публикации: G.Yu. Ishmuratov, M.P. Yakovleva, V.A. Vydrina, K.S. Denisova, R.R. Sayakhov, R.R.Vil 'danova, E.M. Vyrypaev, A.G. Tolstikov. One-Step Synthesis from Castor Oil of Enantiomeric Macrolides // Chemistry of Natural Compounds. – 2017. – V. 53, N 4. – P. 620-622. 19. Изучение трансформаций алкенилфенилзамещенных глицинов относится к одной из мало исследованной области превращений органических молекул. Получение новых гетероциклов с применением реакций этих соединений с электрофилами, циклоприсоединения и других позволило бы выйти к новым гетероциклам бензоксазоциновой и бензоксазиновой структуры. Особо привлекательно то обстоятельство, что в этом ряду есть аксиально-хиральные структуры, причем с достаточно высоким энергетическим барьером взаимопревращения молекул, что приводит к повышению времени их полупревращения почти до 900 лет. Нами впервые получен ряд таких соединений и проведено изучение их трансформации в условиях реакций циклоприсоединения и действия электрофилов (УфИХ РАН, исполнители: д.х.н., Гатауллин Р. Р.).

		Публикации: Guliya G. Bizhanova, Kyril Yu Suponitsky, Yulia V. Vakhitova, Rail R. Gataullin. New atropoisomeric alkenylphenylglycine derivatives: Synthesis of (5R*)- and (5S*)-isomers of (1R*,3aR*,4S*,11S*)-3a,5,9,11-tetramethyl-4,5-dihydro-3aH-1,4-methano[1,3]oxazolo[3,2-a]quinolin-2-one. // Tetrahedron. - 2017. - V. 73. - N 2. - P. 109-115. 20. Несмотря на широкое распространение семичленных лактонов в природных объектах, применение их в органическом синтезе достаточно ограничено, что связано, прежде всего, с их малым содержанием и трудностью выделения. Особый интерес представляют терпеновые производные, содержащие асимметрические центры и способные служить хиральными матрицами для синтеза новых оптически активных соединений как с известной, так и потенциальной биологической и фармакологической активностью. Одним из интересных превращений в ряду лактонов является обнаруженная в УфИХ УФИЦ РАН новая реакция в химии алюминийорганических соединений (АОС) – образование О-изобутильных производных лактолов в процессе низкотемпературного (-70оС) восстановления монотерпеновых семичленных лактонов избытком диизобутилалюминийгидрида (ДИБАГ) в хлористом метилене. Поэтому работа, посвященная синтезу семичленных моно- и тритерпеновых лактонов по реакции Байера-Виллигера с использованием надмуравьиной кислоты и изучение их поведения в условиях низкотемпературного восстановления ДИБАГ, является актуальной. Найдены новые примеры образования О-изобутильных производных лактолов в процессе низкотемпературного восстановления в хлористом метилене избытком ДИБАГ семичленных лактонов: изоментолактона, β-камфолида, (1R,5R,7S)-5,8,8-триметил-3-оксабицикло[5.1.0]октан-4-она, (1R,5R,7S)-5,8,8-триметил-3-оксабицикло[5.1.0]октан-3-она и лактонов 19β,28-эпокси-2-гидрокси-2,3-секо-18α-олеан-3-овой и 19β,28-эпокси-4S-гидрокси-3,4-секо-24-нор-олеан-3-овой кислот. Показано, что замена кольца F в 19β,28-эпокси-28-оксо-4-гидрокси-3,4-секо-18α-олеан-3-овой кислоты с тетрагидрофуранового на пентанолидный ведет к образованию единственного стандартного продукта гидридного восстановления. Установлено, что в условиях этой реакции из (-)-7S-

		ментолактона образуется один эпимер (-)-изобутоксиацеталя, а из 7R-изомера – смесь (1.1:1.0) (2S)- и (2R)-изобутоксиацеталей, что объяснено анализом конформаций исходных ментолактонов квантово-химическим расчётами. Показано, что новая реакция в химии алюминийорганических соединений характерна также для ациклических производных (-)-ментолактона, причем метил 6-гидрокси-3,7-диметилоктаноат ведет себя подобно (-)-ментолактону, а его 6-оксо-аналог – двояко: как (-)-ментолактон и изоментолактон. Руководитель работы – д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., исп. – д.х.н. Яковлева М.П., к.х.н. Выдрина В.А., к.х.н. Муслухов Р.Р. Публикации: 1) Ishmuratov G.Yu., Vydrina V.A., Galkina Yu.A., Yakovleva M. P., Kravchenko A.A., Muslukhov R.R., Tolstikov A.G. Low-temperature reduction by diisobutylaluminum hydride in CH2Cl2 of seven-membered lactones from betulin and S-(+)-camphor // Chemistry of Natural Compounds. – 2015. – V. 51, N 4. – P. 716-720. 2) Ishmuratov G.Yu., Vydrina V.A., Galkina Yu.A., Yakovleva M.P., Ishmuratova N.M., Tolstikov A.G. Natural seven-membered terpene lactones: synthesis and biological activity (review) //Chemistry of Natural Compounds. – 2015. – V. 51, N 6. – P. 1011-1034. https://doi.org/10.1007/s10600-015-1483-5]. 3) Ишмуратов Г.Ю., Выдрина В.А., Галкина Ю.А., Яковлева М.П., Кравченко А.А., Муслухов Р.Р., Толстиков А.Г. Исследование низкотемпературного восстановления ациклических производных (-)-ментолактона диизобутилалюминийгидридом в CH2Cl2 // Ж. орган. химии. – 2015. – Т. 51, № 7. – С. 967-970. 4) Ишмуратов Г.Ю., Выдрина В.А., Галкина Ю.А., Яковлева М.П., Муслухов Р.Р., Сабиров Д.Ш., Кравченко Л.В., Толстиков А.Г. Исследование низкотемпературного восстановления изоментолактона диизобутилалюминийгидридом в CH2Cl2 // Ж. орган. химии. – 2015. – Т. 51, № 8. – С. 1199-1201. 21. Ранее в УфИХ УФИЦ РАН была развита новая стратегия синтеза потенциально биологически и фармакологически активных макролидов, в том числе и хиральных, с азотсодержащими (азинным или дигидразидными) фрагментами, основанная на [1+1]-конденсации ахиральных и оптически активных α,ω-дикетонов, содержащих одну или две сложноэфирные группы, с гидразингидратом или гидразидами ряда дикарбоновых кислот. Один из

		синтезированных макроциклов – 15,25-диметил-1,8-диокса-16,17,23,24-тетраазациклогентриаконта-15,24-диен-2,7,18,22-тетраон – проявил антибиотическую (на уровне эритромицина) in vitro и in vivo активность к ряду патогенных микроорганизмов. Поэтому исследования, посвященные синтезу новых потенциально биологически и фармакологически активных макроциклов, включая оптически активные, с эфирными, азинными и гидразидными (в т.ч. диацилгидразинными) фрагментами, ключевой стадией которого является [1+1]-конденсация α,ω-дикетоэфиров или α,ω-дикетодиэфиров с гидразингидратом и дигидразидами дикарбоновых кислот, являются актуальными и востребованными. Показано, что [1+1]-конденсация доступных из тетрагидропирана α,ω-дикетонов с дигидразидом эндо,эндо-2,3-норборнандикарбоновой кислоты протекает с образованием макролидов с азинными фрагментами (т.к. в данном случае гидразин является более реакционноспособным, чем дигидрокси-N-аминоимид), тогда как [1+1]-взаимодействие с дигидразидами 5,6-эндо,экзо- и эндо,эндо-дигидроксинорборнандикарбоновых кислот приводит к линейным имидоиминам из-за повышенной реакционной способности N-аминоимида в реакции конденсации с карбонильной функцией. Руководитель работы – д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., исп. – д.х.н. Яковлева М.П., д.с.-х.н., к.х.н. Ишмуратова Н.М., к.х.н. Муслухов Р.Р., к.х.н. Вырыпаев Е.М., асп. Шутова М.А. Публикации: 1) Ишмуратов Г.Ю., Яковлева М.П., Шутова М.А., Муслухов Р.Р., Вырыпаев Е.М., Ишмуратова Н.М., Толстиков А.Г. Взаимодействие гидразидов эндо,эндо-2,3-норборнандикарбоновой кислоты и ее 5,6-эндо,эндо- и эндо,экзо-диольных производных с 7-оксооктиловым эфиром 7-оксооктановой кислоты и бис(7'-оксооктил)гександиоатом // Ж. орган. химии. – 2015. – Т. 51, № 6. – С. 848–852. 22. Сопряженная еноновая система (R)-4-ментен-3-она, доступного из l-ментола, открывает широкие перспективы для использования в органическом синтезе. Ранее упоминалось о его значительно меньшей реакционной способности в сравнении с обычными циклическими α,β-ненасыщенными кетонами в реакциях 1,2- и 1,4-присоединения металлоорганических реагентов, инертности в реакциях Михаэля и образования пиразолинов.

		Поэтому расширение синтетического потенциала (R)-4-ментен-3-она и выявление особенностей реакций тиилирования и последующего окисления для направленного синтеза низкомолекулярных биорегуляторов является актуальной задачей. Обнаружено образование необычных продуктов – (1S,2R,4R)-(додецилсульфонил)- и (1S,2R,4R)-(гексилсульфонил)-1-изопропил-4-метилциклогексанов, 1-((1R,2S,5R)-2-изопропил-5-метилциклогексилсульфонил)бензола – в окислительных превращениях 3-ментеновых сульфидов в системе H2O2–AcOH. На основании квантово-химических расчетов в приближении B3LYP/6-31G(d,p) предложена схема трансформации ненасыщенных 3-ментеновых сульфоксидов в насыщенные сульфоны без участия окислителя. Данная схема подтверждена экспериментально: образование насыщенных сульфонов из 3-ментеновых сульфоксидов наблюдается и в водных растворах кислот в отсутствии H2O2. Руководитель работы – д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., исп. – д.х.н. Яковлева М.П., к.х.н. Муслухов Р.Р., д.х.н. Талипов Р.Ф., к.х.н. Тухватшин В.С. Публикации: Ishmuratov G.Yu., Tukhvatshin V.S., Yakovleva M.P., Vakulin I.V., Muslukhov R.R, Pasko P.A., Talipov R.F. Unexpected acidic transformation of allylic menthene sulfoxides into saturated sulfones // Mendeleev Commun. – 2016. – V. 26, N 1. – P. 81-82. DOI: 10.1016/j.mencom.2016.01.032 23. Арилоксиалкановые кислоты и их производные, занимая ведущее место по объемам производства и использования в сельском хозяйстве, применяются в качестве пестицидов, гербицидов, кроме того, используются для получения лекарственных препаратов и реагентов в органическом синтезе. Разработан эффективный однореакторный метод получения метиловых эфиров арилоксиуксусных кислот, базирующийся на низкотемпературном озонолизе бензил- и фенилаллиловых эфиров. Руководители работы – д.х.н. Злотский С.С., д.х.н. Ишмуратов Г.Ю., исп. – к.х.н. Легостаева Ю.В., м.н.с. Гарифуллина Л.Р. Публикации: Раскильдина Г.З., Легостаева Ю.В., Гарифуллина Л.Р., Султанова Р.М., Ишмуратов Г.Ю., Злотский С.С. Новый метод получения алкоксиуксусных кислот // Доклады Академии наук. 2015. Т. 462. № 3. С. 307–309.

		24. Полианилин (ПАНИ) с момента обнаружения полупроводниковых свойств превратился в перспективный электропроводящий полимер. Благодаря уникальному комплексу свойств и высокой стабильности, ПАНИ первым среди электропроводящих высокомолекулярных соединений стал использоваться на практике. Основным недостатком ПАНИ является то, что он не плавится и практически нерастворим в типовых органических растворителях. Поэтому расширение ассортимента электропроводящих высокомолекулярных соединений, прежде всего, исходя из функционализированного анилина, и исследование электрофизических и физико-химических свойств целевых продуктов является актуальным. В лаборатории фармакофорных циклических систем УфИХ УФИЦ РАН методом окислительной полимеризации из продукта амино-перегруппировки Кляйзена получен поли-2-(1-метил-2-бутенил)анилин и исследованы его электрохимические свойства. Полученный ПАНИ имеет наименьший энергетический уровень ВЗМО, что предопределяет его использование в качестве донорного производного в активном слое при конструировании органических солнечных батарей (УфИХ УФИЦ РАН, руководители работ: д.х.н. Мустафин А.Г., д.х.н. Абдрахманов И.Б.). Публикации: 1) Биглова Ю.Н., Салихов Р.Б., Абдрахманов И.Б., Салихов Т.Р., Сафаргалин И.Н., Мустафин А.Г. Получение и исследование растворимых функционализированных полианилинов // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59, №6. – С. 1228-1233; 2) Шишкина А.Н., Мустафин А.Г., Абдрахманов И.Б., Герчиков А.Я. Анализ механизма и кинетики окислительной полимеризации анилина // Вестник Башкирского университета. – 2017. – Т. 22, №1. – С. 59-64 25. Современные тенденции развития в области добычи нефти и газа, а также рационального природопользования диктуют необходимость создания «зеленых» нефтепромысловых реагентов, применение которых существенно снижет отрицательное воздействие на окружающую среду. Особенно это актуально для районов Крайнего Севера и Арктической зоны, экосистема которых в высшей степени чувствительна к антропогенному воздействию и очень медленно восстанавливается после неразумного вмешательства. Среди

		многообразия органических природных соединений полисахариды представляют самую внушительную по своей биомассе природную "продукцию", которая признана в целом безопасной для окружающей среды. Полисахариды обладают уникальными физико-химическими характеристиками и на их основе могут быть созданы новые высокоэффективные «зеленые» нефтепромысловые реагенты. На основе природных полисахаридов и их производных разработаны перспективные экологически безопасные ингибиторы гидратообразования, эффективно работающие в малых дозировках в процессах нефте- и газодобычи. Это создаёт перспективу для замены используемых сегодня токсических реагентов, особенно метанола. На основе природного полисахарида из растительного сырья создан нефтепромысловый реагент, который относится к низкоагрессивным реагентам и по эффективности превосходит в 100–200 раз известные ингибиторы гидратообразования, в 600–800 раз превосходит метанол и диэтиленгликоль, проявляет свойства термодинамических ингибиторов гидратообразования. (УфИХ РАН, исполнители: Докичев В.А., Киреева Д.Р., Фахреева А.В., Рахимова Н.Т.). Разработана методология целенаправленного получения природных углеводов и их производных как путем выделения из растительного сырья, так и синтетических трансформаций. На основе производных природных полисахаридов разработаны новые нефтепромысловые реагенты, которые являются высокоэффективными «зелеными» ингибиторами солеотложения. Предлагаемые реагенты в результате специфической адсорбции на формирующихся гранях образующихся кристаллов ингибируют процессы агрегации, агломерации и солеотложения карбонатов и сульфатов кальция, бария и стронция и приводят к образованию полиморфных кристаллических форм. Обнаружено, что при одновременном воздействии полисахаридов и электромагнитного поля на процесс кристаллизации солей кальция, бария и стронция наблюдается практически важный синергетический эффект, приводящий к образованию наноразмерных кристаллов. (УфИХ РАН, исполнители: д.х.н. Докичев В.А., к.х.н. Киреева Д.Р., асп. Фахреева А.В., асп. Рахимова Н.Т.).

		Публикации: 1) Э.Р. Ишмияров, Н.Т. Рахимова, Д.Р. Латыпова, М.И. Абдуллин, А.И. Волошин, В.А. Докичев. Новый нефтепромысловый реагент комплексного действия, обладающий свойствами ингибитора солеотложений и нейтрализатора сероводорода // Журн. приклад. хим., 2015, 88, № 7, 1083-1086. 2) Д.Р. Латыпова, А.Г. Бадамшин, С.П. Кулешов, Э.О. Тимашев, Б.А. Кульницкий, Ю.В. Томилов, Н.Э. Нифантьев, В.А. Докичев. Новый высокоэффективный углерод-кремнеземный сорбент // Журн. приклад. хим., 2015, 88, 9, 1282−1287. 3) A.G. Badamshin, L.V. Spirikhin, R.F. Salikov, V.A. Dokichev, Yu.V. Tomilov, Lewis acid-catalyzed reactions of N-allylanilines with diazo compounds involving aza-Claisen rearrangement // Mendeleev Commun., 2015, 25 (6), 438–439. 4) Ф.Г. Ишмуратов, Е.И. Коптяева, А.И. Волошин, А.Г. Телин, Ю.В. Томилов, Н.Э. Нифантьев, В.А. Докичев. Арабиногалактан – эффективный ингибитор солеотложения карбоната кальция // Журнал прикладной химии. 2015, № 12, 1672-1675. 5) В.А. Докичев, Е.И. Коптяева, Ф.Г. Ишмуратов, С.Р. Алимбекова, Ю.В. Томилов, Н.Э. Нифантьев. Углеводы – новый класс «зеленых» ингибиторов солеотложений. // Нефтяное хозяйство. – 2016. – 5. – С. 92-94. 26. Производные гексагидропиримидина и тетрагидропиридина привлекают интерес исследователей благодаря широкому спектру проявляемой биологической активности – противомалярийной, антибактериальной, инсектицидной и анальгетической. Среди представителей данных азотистых гетероциклов выявлены соединения, оказывающие антипролиферативное действие, регулирующие поток ионов кальция, влияющие на мускариновые рецепторы и выступающие в роли ингибиторов гамма-аминомасляной кислоты. Конденсацией фторированных 1,3-дикарбонильных соединений с формальдегидом и гидрохлоридами эфиров (S)-аминокислот в ацетатном буфере, AcONa–AcOH (pH 5.9) при комнатной температуре получены хиральные 1,3-гексагидропиримидины, содержащие фторацетильную группу с выходами до 70%. С использованием методов ЯМР и хиральной высокоэффективной жидкостной хроматографии (chiralHPLC) однозначно доказано отсутствие эпимеризации стереогенных центров аминокислот и образование единственного диастереомера 1,3-

		гексагидропиримидина. Разработан новый однореакторный метод синтеза хирального трифторацетата тетрагидропиридиния, основанный на реакции 3-оксо-4,4,4-трифторбутаноата с формальдегидом и гидрохлоридом этилового эфира (S)-тирозина. Методами ЯМР показано, что 5-этоксикарбонил-1,3-бис[2-этокси-1-(4-гидроксибензил)-2-оксоэтил]-3,4,5,6-тетрагидро-пиридиний-1 трифторацетат в слабополярных растворителях (CDCl3) существует в виде устойчивых ассоциатов с молекулярной массой порядка 1000. В более полярных (CD3CN) эти ассоциаты разрушаются и в растворе присутствует только мономолекулярное соединение. Впервые показана возможность использования циклических аминалей для направленного синтеза полифункционизированных 1,2,3,4-тетрагидропиридинов, представляющих интерес в качестве потенциальных биологически активных веществ, а также структурных фрагментов более сложных полициклических систем. Реакция 1,3,5-гексагидротриазинов с ацетоуксусным эфиром при кипячении в MeOH в течение 5 ч приводит к образованию соответствующих 1,2,3,4-тетрагидропиридинов с выходами до 90%. При применении продукта конденсации 1,3-пропилендиамина с формальдегидом - 1,3,7,9,13,15,19,21-октаазапентацикло-[17.5.1.13,21.17,1319,15]октакозана с ацетоуксусным эфиром синтезирован тетраэтил 1,1'-пропан-1,3-диил-бис(3-ацетил-6-метил-1,2,3,4-тетрагидропиридин-3,5-дикарбоксилат) с выходом 66%. (УфИХ РАН, исполнители: Докичев В.А., Киреева Д.Р., Гибадуллина Н.Н., Бадамшин А.Г.). Публикации: 1) D.R. Latypova, A.G. Badamshin, N.N. Gibadullina, N.S. Khusnutdinova, L.F. Zainullina, Y.V. Vakhitova, Y.V. Tomilov, V.A. Dokichev. Synthesis and in vitro cytotoxicity evaluation of some N-substituted α-amino acid derivatives containing a hexahydropyrimidine moiety. // Med. Chem. Res. – 2017. – 26. – 5. - P. 900–908. 2) N.N. Gibadullina, D.R. Latypova, R.A. Novikov, Y.V. Tomilov, V.A. Dokichev. Reaction of trifluoromethyl 1,3-dicarbonyl compounds with formaldehyde and esters of natural б-aminoacids. // Arkivoc. – 2017. – iv. – P. 222-235. 3) L.I. Vlasova, D.R. Latypova, L.A. Akhmet'yanova, N.N. Gibadullina, A.A. Ratner, A.G. Telin, V.A. Dokichev. Preparation and hydrophobizing properties of carboxylic acid N-[3-(dimethylamino)propyl]amide hydrochlorides. // Russ. J. Appl. Chem. – 2017. – 90. –

		7. – P. 1102–1106. 4) A.G. Badamshin, A.N. Lobov, V.A. Dokichev. Tetrahydropyridines from Ethyl Acetoacetate and Cyclic Aminals. // Russ. J. Org. Chem. - 2017. - Vol. 53. - №. 10. - pp. 1520–1523. 5) Н.Н. Гибадуллина, Д.Р. Латыпова, Т.Р. Нугуманов, Л.В. Спирихин, В.А. Докичев. Синтез полифункционализированных 1,1'-(1,n-алкандиил)-бис(1,2,3,4-тетрагидропиридинов). // ХГС. – 2017. Химия гетероциклических соединений. – 2017. – Т.53. - №10. – С.1098–1102. 6) Gibadullina N.N., Latypova D.R., Vakhitov V.A., Khasanova D.V., Zainullina L.F., Vakhitova Yu. V., Lobov A.N., Ugrak B.I., Tomilov Yu.V., Dokichev V.A. Synthesis and cytotoxic activities of difluoroacetyl-substituted hexahydropyrimidine derivatives // Journal of Fluorine Chemistry. 2018. V. 211. P. 94-99. (DOI 10.1016/j.jfluchem.2018.04.011). 27. В ряду циклопентеновых простагландинов (PG), эндогенные Δ12–простагландин J2 и 15-дезокси–Δ12,14–простагландин J2 (15d-Δ12,14-J2) привлекают внимание присущими им мощными противораковыми и антивирусными свойствами. В их структуре кросс-сопряженная диеноновая система ответственна за проявление биоактивности. Циклопентеновые PG легко проникают через клеточную мембрану и как высокоактивные, электрофильного характера акцепторы Михаэля, селективно (и обратимо) связываясь с сульфгидрильными группами глутатиона и цистеина в протеинах, ингибируют клеточный цикл, репликацию вирусов и др. Кроме того, 15d-Δ12,14-PGJ2 промотирует рост нейритов в PC12 клетках, известен как лиганд для PPARγ-рецепторов ядра, ответственных за транскрипцию генов, запуск воспалительных процессов, гипертензии, апоптоза и других. На основе метилового эфира клопростенола разработан оригинальный переход к новому типу простагландинов - 15-дезокси–Δ12,14–простагландину D, показавшему цитотоксичность в отношении HEK 293, Hep G2 и Jurkat в □M концентрациях. Данный D/J-типа новой топологии простагландин – предшественник соответствующего кросс-сопряженного омега-арилокси PGJ2. (УфИХ РАН. Исполнители: д.х.н. Мифтахов М.С., к.х.н. Востриков Н.С., асп. Лобко И.Ф., д.б.н. Вахитова Ю.В. (ИБГ УФИЦ РАН)). Публикации: N.S. Vostrikov, I.F. Lobko, L.V. Spirikhin, Y.V. Vakhitova, K.K. Pivnitsky, M.S.

		Miftakhov. Side-modified 15-deoxy-Δ12,14-prostaglandin D2, precursor of corresponding PGJ2. Synthesis from cloprostenol and anticancer activity // Mendeleev Commun. - 2017. - V.27. - P. 125-127. 28. Хиральные соединения топологии бицикло[3.1.0]гексана затребованы как легкотрансформируемые блоки в направленном синтезе простагландинов, карбануклеозидов, циклопентеноновых антибиотиков и др. На основе циклопентановых аллилсиланов с боковой активированной C=C-связью разработана новая инициируемая фторид-ионом тандемного типа реакция карбоциклизации с образованием соответствующих производных бицикло[3.1.0]гекс-2-ена. (УфИХ РАН, руководитель: д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Гимазетдинов, асп. Альмухаметов А.З.) Публикации: Gimazetdinov A.M. A.Z. Al'mukhametov, L.V. Spirikhin, M.S. Miftakhov. Fluoride anion-induced intramolecular cyclopropanation of allylsilanes // Tetrahedron Letters, 2017, 58 (33), pp. 3242-324. 2) А.М. Гимазетдинов, А.З. Альмухаметов, Л.В. Спирихин, М.С. Мифтахов. Некоторые аспекты внутримолекулярной карбоциклизации метилового эфира (2E)-3-[(1S,2R,5R)-2-(трет-бутилдиметилсилилоксиметил)-5-(триметилсилил)-циклопент-3-ен-1-ил]проп-2-еновой кислоты и её производных // Журн. орг. химии, 2017, т. 53, вып. 6, с. 821–829. 29. Природные пирролизидиновые алкалоиды проявляют специфические виды активности (гепатотоксичность, мутагенность), тем не менее, на основе их модифицированных производных созданы препараты для лечения бактериальных и вирусных инфекций, раковых заболеваний. В синтезах пирролизидинов характерны пошаговые схемы, исходящие из производных пролина и пирролидина. Разработка методов одностадийного синтеза пирролизидинов из доступных и дешевых исходных представляется актуальной задачей. Разработан новый синтез биоактивных пирролизидинов one-pot сочетанием аминокислот (глицина), альдегидов и акрилатов по схеме двойного 1,3-диполярного циклоприсоединения. Структура одного из продуктов подтверждена данными рентгеноструктурного анализа. УфИХ РАН. Руководитель: д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Егоров В.А., д.х.н. Гималова

		Ф.А., к.х.н. Хасанова Л.С. Публикации: Egorov V.A., Khasanova L.S., Gimalova F.A., Lobov A.N., Miftakhov M.S. Straightforward synthesis of pyrrolizidines // Mendeleev Communications. – 2017. - V. 27. - P.163-165. 30. SmI2 - уникальный одноэлектронный восстановитель, зачастую позволяющий реализовать оригинальные реакции и переходы в ходе синтезов труднодоступных структур. В химии карбапенемов этот реагент не использовался, хотя в их синтезах есть достаточно возможностей для его применения. В промотируемых SmI2 реакциях (3R,4R)-3-[(1R)-1-(трет-бутилдиметилсилилокси)этил]-4-ацетоксиазетидин-2-она, широко используемого в синтезе карбапенемов, с метилбромпропионатом получены аномальные b-кетоэфирного типа продукты алкилирования. Последние в реакциях NH-алкилирования метилбромацетатом (ТГФ, -78оС, NaHMDS) претерпевали необычное N(1)-C(4)-расщепление лактама с образованием соответствующих ациклических амидов. (Руководитель работ – д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Валиуллина З.Р., к.х.н. Селезнева Н.К., к.х.н. Хасанова Л.С.). Публикации: Z.R. Valiullina, L.S Khasanova, N.K Selezneva, Yu.N. Belokon, L.V. Spirikhin, M.S. Miftakhov. Promoted by samarium reaction of (3R,4R)-3-((1R)-1-{[tert-butyl(dimethyl)silyl]oxy}ethyl)-4-acetoxy-azetidin-2-one with methyl 2-bromopropianate. Unusual decyclization of azetidin-2-one derivative in approaches to carbapenems analogues // Organic & Medicinal Chemistry International Journal., 2017, Vol. 2 Is. 5, ID555597 31. Антибиотики β-лактамного ряда, хотя и имеют давнюю историю, и в настоящее время остаются наиболее затребованными в лечении бактериальных инфекций. Среди них карбапенемы считаются одним из лучших, однако сегодня проблемы резистентности актуальны и для них. Недавно открытые металло-b-лактамазы разрушающе действуют на бета-лактамы этого ряда. Поэтому синтез и последующее исследование новых карбапенемов одна из важных задач медицинской химии. В подходах к антибиотикам карбапенемового ряда на примере производного L-метионина продемонстрирован вариант спейсерного связывания аминокислот с бициклическим кором

		карбапенемов при содействии 2-этокситиоланона, открывающий выход к новой серии модифицированных карбапенемов, содержащих при С(3) амид меркаптоуксусной кислоты. (Руководитель работ – д.х.н. Мифтахов М.С., исполнители: к.х.н. Валиуллина З.Р., к.х.н. Селезнева Н.К., к.х.н. Хасанова Л.С., д.х.н. Гималова Ф.А., асп. Галеева А.М.). Потенциал практического применения полученных научных результатов: разработка соединений – кандидатов в лекарственные препараты нового поколения, использование результатов работы для удовлетворения общественной потребности в повышении эффективности терапии заболеваний человека и животных; применение продуктов разработки в тонкой химической технологии и биотехнологии, фармацевтике, а также в медицине, ветеринарии, в сельском хозяйстве; создание эффективных нефтепромысловых реагентов для решения экологических проблем; создание уникальных и конкурентоспособных на международном уровне продуктов и материалов.
8	Диссертационные работы сотрудников организации, защищенные в период с 2015 по 2017 год.	ИФМК УФИЦ РАН 1. «Трансформация спектроскопических состояний электронно-возбужденных молекул в процессах синглет-триплетной интеркомбинационной конверсии» Цеплина Светлана Николаевна, к.ф-м.н., 2016 2. «Трансформация микроструктуры и физико-механические свойства ультрамелкозернистых сплавов TiNi при многократных мартенситных превращениях», Чуракова Анна Александровна, к.ф-м.н., 2016 3. «Резонансный захват электронов молекулами органических соединений: эксперимент, фундаментальные аспекты и возможные приложения в молекулярной электронике и биохимии» Пшеничнюк Станислав Анатольевич, д.ф.-м.н., 2017 4. «Атомно-силовая микроскопия субмикронных пленок полидифениленфталида» Карамов Данфис Данисович, к.ф.-м.н.,2017 УфИХ УФИЦ РАН 1. Металлокомплексные соединения в радикально-инициируемой полимеризации. Квантово-химическое обоснование концепции радикально-

		координационной полимеризации. А.К. Фризен, д.х.н., 2017 г. 2. Закономерности формирования структуры фуллерен(С60)содержащих полимеров в радикальной (со)полимеризации мономеров винилового и аллилового рядов. Р.Х. Юмагулова, д.х.н., 2017 г. 3. Фотофизические и фотохимические свойства 5-фторурацила в водных растворах и твердом состоянии. М.В. Султанбаев, к.х.н., 2015 г. 4. Фото- и хемилюминесценция 1,2,4-триазола и его производных в растворах. Р.Р. Каюмова, к.х.н., 2015 г. 5. Синтез практически значимых производных этанооксазолохинолина, бензоксазонина, бензоксазоцина и индолина из орто-пентениланилинов. Г.Г. Бижанова, к.х.н., 2015 6. Семичленные терпеновые лактоны: синтез и низкотемпературное восстановление диизобутилалюминийгидридом. Ю.А. Галкина, к.х.н., 2015 г. 7. Превращения пероксидных продуктов озонолиза Д3-карена, б-пинена, (S)-лимонена под действием гидрохлоридов семикарбазида и гидроксиламина. Л.Р. Гарифуллина, к.х.н., 2015 8. 2-(циклопент-1-енил)анилин в синтезе новых 3,1-бензоксазин-4,1'-циклопентановых производных. Р.Р. Зарипов, к.х.н., 2015 9. Синтез и химические превращения производных левопимаровой кислоты. А.Р. Узбеков, к.х.н., 2015 10. Синтез 1,2,4-триоксоланов и 1,2,4,5-тетраоксанов в ряду стероидов и тритерпеноидов. Э.Ю. Ямансаров, к.х.н., 2015 11. Синтез, полимеризационные превращения и свойства новых метанопроизводных фуллерена С60. В.В. Михеев, к.х.н., 2015 12. Гидрогели на основе модифицированных гиалуроновой кислоты и хитозана. Р.Р. Вильданова, к.х.н., 2016 г. 13. Синтез аналогов по циклу А элеутезидов, дитерпеновых «морских» метаболитов, на основе левоглюкозенона. А.А. Першин, к.х.н., 2016 14. Синтез и химические превращения 2,3-алленоатов. А.М. Гумеров, к.х.н., 2016 15. [2+2]аддукты дихлоркетена с циклопентадиеном и диметилфульвеном в подходах к циклопентаноидам и блокам. Синтез эпоксилактона Кори и Энтекавира. В.А. Ахметьянова, к.х.н., 2016 16. Производные монотерпеноидов, рицинолевой кислоты и тетрагидропирана в синтезе макролидов с

		азинным и гидразидными фрагментами. М.А. Рублева, к.х.н., 2016 17. Синтез модифицированных тритерпеноидов лупанового ряда с фрагментами азагетероциклов и аминоалкансульфокислот. С.Н. Дубовицкий, к.х.н., 2016 18. Реагенты для нефтепромысловой химии (нейтрализаторы сероводорода, ингибиторы солеотложения и бактерициды) на основе полуацеталей формальдегида. Ишмияров Э.Р. , к.х.н., 2016 19. Экстракция палладия(II) и золота(III) производными 1Н-1,2,4-триазола и дигидрохлоридом триацилированного пентаэтиленгексамина. Л.Г. Голубятникова, к.х.н., 2017 г. 20. Рутин лузги гречихи. Синтез эфиров и бромпроизводных кверцетина. Э.Р. Каримова, к.х.н., 2017 21. Левоглюкозенон в синтезе соединений иридоидной топологии. И.М. Биктагиров, к.х.н., 2017 22. Лактондиол Кори и клопростенол в синтезе циклопентеноновых простагландинов, Энтекавира и простамидов. И.Ф. Лобко, к.х.н., 2017
ИНТЕГРАЦИЯ В МИРОВОЕ НАУЧНОЕ СООБЩЕСТВО		
9	Участие в крупных международных консорциумах и международных исследовательских сетях в период с 2015 по 2017 год	
10	Наличие зарубежных грантов, международных исследовательских программ или проектов в период с 2015 по 2017 год.	ИФМК УФИЦ РАН 1. РФФИ 14-02-91374 СТ_а Разработка новых тонкопленочных мультиферроиков и композитных материалов для приложений в спинтронике, 2014 – 2015 г. руководитель А.К. Звездин, Финансирование – 1500 т. руб., партнер Gebze Institute of Technology, Турция Вклад организации: Исследовано взаимодействие сегнетоэлектрических и антиферромагнитных доменных границ в мультиферроике феррите висмута. Показано, что особенности сегнетоэлектрической и связанной с ней магнитной доменных структур BiFeO3 определяются структурными параметрами (смещением ионов Bi, Fe относительно центросимметричных позиций, вектором антиферродисторсии, связанным с

		антивращением кислородных октаэдров), определена связь вектора намагниченности со структурными параметрами порядка. Рассчитано распределение намагниченности в окрестности 109 -, 71 - , 180 - градусных сегнетоэлектрических доменных границ в BiFeO3. УфИХ УФИЦ РАН 1. Грант British Council grant under Research Links and Newton Fund, UK. University of Cambridge, Department of Materials Science & Metallurgy, Materials Chemistry Research Group. "Electrochemistry of lithium electrodes in the electrolyte systems for lithium-sulphur batteries (Изучение основных закономерностей электрохимического осаждения металлического лития из электролитных систем для литий-серных аккумуляторов)". Были предоставлены образцы литиевых электродов для изучения основных закономерностей электрохимического осаждения металлического лития из электролитных систем для литий-серных аккумуляторов на приборах и оборудовании Кембриджского университета. 30.05.2015-30.08.2015. 601855,00 руб. (7574,71 фунтов стерлингов Соединенного королевства,GBP). Международные проекты: 1. UK, University of Cambridge, Department of Materials Science & Metallurgy, Materials Chemistry Research Group. COLLABORATION AGREEMENT in the area of «Energy Storage Devices». Цель проекта - организация совместных исследований в области разработки устройств для хранения энергии «Energy Storage Devices». 01.07.2014-30.06.2017. 2. UK, University of Cambridge, Department of Materials Science & Metallurgy, Materials Chemistry Research Group. COLLABORATION AGREEMENT in the area of «Energy Storage Devices». Цель проекта - организация совместных исследований в области разработки устройств для хранения энергии «Energy Storage Devices». 01.07.2017-31.05.2020. 3. Турецкая Республика, Istanbul Technical University, Faculty of Chemical and Metallurgical Engineering, Department of Metallurgical and Materials Engineering. COLLABORATION AGREEMENT in the area of «Energy Storage Devices». Цель проекта - организация совместных исследований в области разработки устройств для хранения энергии «Energy Storage Devices». 22.06.2017-21.06.2020. 4. UK, Sigma Lithium Ltd. COOPERATION AGREEMENT CA2014.03.26. Development of the

		technology electrochemical sources of electrical energy based on lithium-sulfur, as well as accumulators and components on its bases. Разработка технологии электрохимических источников электрической энергии на основе литий-серы, а также аккумуляторов и компонентов на ее основе. С 26.03.2014, бессрочный. 5. UK, Sigma Lithium Ltd. Договор подряда на выполнение научно-исследовательских работ. «Исследования электрохимических свойств тонкопленочных литиевых электродов, полученных методом вакуумного осаждения по технологии Сигма Литиум». Создание, совершенствование/модификация оборудования и его узлов для исследования электрохимических свойств тонкопленочных литиевых электродов, полученных методом вакуумного осаждения по технологии Сигма Литиум. 01.07.2015-30.06.2017. 30000,00 фунтов стерлингов Соединенного королевства (GBP). 6. Republic of Korea, LG Chem Ltd. AGREEMENT CH2014.02 «Development of electrolyte system for lithium-sulfur batteries». Разработка новых электролитных композиций для литий серных аккумуляторов. 01.02.2014-30.04.2015. 31770,00 долларов США 7. Republic of Korea, LG Chem Ltd. AGREEMENT CH2015.17 «Development of new high-performance positive electrodes for lithium-sulfur batteries» Разработка новых высокоэффективных положительных электродов для литий серных аккумуляторов. 01.07.2015-30.06.2016. 24054,00 долларов США 8. LG Chem Ltd., Republic of Korea, Соглашение CH2017.13 «Development of lithium electrodes with barrier layer for lithium-sulfur batteries». «Разработка литиевого электрода с барьерным слоем для литий серных аккумуляторов». Разработка литиевого электрода с барьерным слоем для литий серных аккумуляторов. 01.08.2017-31.10.2018. 12366,00 долларов США 9. People's Republic of China, Xi'an University of Technology. Контракт DFR503501 «Development of electrolytes for lithium-sulphur batteries with sulphur - carbon composite cathodes and technology of their production». Разработка электролита для литий-серных батарей с серо-углеродным композитным катодом и технологии его изготовления. 26.02.2016-30.04.2018. 56457,48 долларов США (385000,00 юаней, RMB)

		10. Договор с Институтом микробиологии, иммунологии и молекулярной медицины Университета Цзы Чи (Tzu Chi University) (Тайвань) по изучению хемотерапевтического эффекта глицирризиновой кислоты и ее производных по отношению к карциноме легких, а также исследованию отношения структура-активность производных глицирризиновой кислоты. Соглашение от 26.12.2013 г., рассчитано на 2014-2017 гг. Координатор со стороны УфИХ РАН – д.х.н., проф. Балтина Л.А. На условиях взаимовыгодного сотрудничества, финансовое обеспечение не требуется. Изучено канцеропревентивное действие ряда производных глицирризиновой кислоты (15 соединений) в отношении рака легкого на in vitro моделях. Исследованные соединения показали слабовыраженную активность. 10. Соглашение с Институтом микробиологии, иммунологии и молекулярной медицины Университета Цзы Чи (Tzu Chi University) (Тайвань) по изучению хемотерапевтического эффекта глицирризиновой кислоты и ее производных по отношению к карциноме легких, а также исследованию отношения структура-активность производных глицирризиновой кислоты. Соглашение от 26.12.2013 г., рассчитано на 2014-2017 гг. Координатор со стороны УфИХ РАН – д.х.н., проф. Балтина Л.А. На условиях взаимовыгодного сотрудничества, финансовое обеспечение не требуется. Изучено канцеропревентивное действие ряда производных глицирризиновой кислоты (15 соединений) в отношении рака легкого на in vitro моделях. Исследованные соединения показали слабовыраженную активность. 11. Соглашение с Китайским медицинским университетом (г. Тайчжун, Тайвань) в области разработки новых лекарственных препаратов для профилактики и лечения опасных инфекционных заболеваний на основе природных соединений. Соглашение о сотрудничестве от 22.02.2017 г., рассчитано на 2017-2019 гг. В обязанности со стороны УфИХ РАН входит: создание библиотеки производных тритерпеноидов и алкалоидов для исследования зависимости структура-активность, подготовка очищенных образцов этих производных для скрининга антивирусной активности in vitro и для расширенных исследований (координатор со стороны УфИХ РАН – д.х.н., проф. Балтина Л.А.).

		На условиях взаимовыгодного сотрудничества, финансовое обеспечение не требуется. 12. Соглашение с Институтом Рака (NCI) Аллергии и Инфекционных заболеваний (NIAD в т.ч. NCI) в области тестирования синтезированных в УфИХ РАН соединений на антивирусную активность. Соглашение от 14.12.2015 г. Координатор со стороны УфИХ РАН – д.х.н., проф. О.Б. Казакова. На условиях взаимовыгодного сотрудничества, финансовое обеспечение не требуется. Изучена цитотоксичность около 200 разнообразных производных тритерпеноидов в отношении панели 60 клеточных линий девяти типов рака человека в NCI (Национальный институт рака, США). Выявлены новые производные тритерпеноидов, обладающие противоопухолевой активностью in vitro, а именно: 19-[1-метил-4-проп-2-ин-1-илпиперазин]-20,29,30-тринор-бетулин и 4-(4метилпиперазин-1-ил)бут-2-ин-1-ил-N-(3-гидрокси-28-оксоолеан-12-ен-28-ил)глицинат (клетки лейкоза SR и рака толстой кишки HT29, HCT-15), N-пропаргиламиноалкилированные 2,3-индолоолеаноловая и 2,3-индолоурсоловая кислоты с фрагментом N-метилпиперазина (клетки лейкоза SR, рака легкого NCI-H460), 2,3-индоло-уваол и 2,3-индоло-28-цианоэтокси-бетулин (клетки рака легкого NCI-H522, толстой кишки COLO 205). Для 2,3-индолоолеаноловой и 2,3-индолобетулиновой кислот впервые выявлена активность в отношении 19 и 9 клеточных линий 6 и 4 типов рака человека. 30-Бромо-3,28-диацетокси-20-оксо-бетулин активен в отношении 6 клеточных линий 4 типов рака человека (в концентрации 10 μM вызывал 100% ингибирование роста и гибель клеток лейкоза MOLT-4, CCRF-CEM, рака легкого NCI-H522, меланомы LOX-IMVI и рака яичников OVCAR-3). Для соединений-лидеров получены данные в экспериментах в пяти дозах. Так, среди циано- и алкинилтритерпеноидов, а также продуктов их модификаций по реакциам 1,3-диполярного циклоприсоединения и реакции Манниха выявлена высокая активность для 2,3-секо-2-циано-4(23)-ен-луп-17-метилоксазола со значением lg GI50 = – 5.36 и метилового эфира 2-тетразолил-2,3-секо-4(23)-ен-луп-28-овой кислоты lg GI50 = –4.80. Наиболее высокую цитотоксичность проявили производные N-метилпиперазиниламидов олеаноловой, урсоловой и глицирретовой кислот, модифицированных по кольцу А со значением процента роста клеток в пределах от –74.90% до –

		10.67%. В исследованиях в пяти дозах соединением-лидером стал N-метилпиперазиниламид 2-{3-пиридилиден}-3-оксоурс-12-ен-28-овой кислоты с log GI50 = – 6.12, что указывает на его перспективность для более глубоких исследований. 13. Соглашение с NanoBMat Research Company (Германия) по обмену научной, академической и технической информацией и соответствующими учебными материалами и другой информацией, представляющей взаимный интерес; определению возможности для совместных исследовательских проектов и развития сотрудничества в области исследований на основе следующих тем исследований: «Новые материалы, производные природных соединений, полимеры, наноматериалы и нанокомпозиты, новые лекарственные формы для фармацевтического применения, медицины и сельского хозяйства»; по организации и участию в совместных научных мероприятиях; публикация результатов сотрудничества в виде статей, обзоров в научных журналах и книгах. Соглашение от 02.12.2014 г. Рассчитано на 10 лет до 2024 г. На условиях взаимовыгодного сотрудничества, финансовое обеспечение не требуется.
11	Участие в качестве организатора крупных научных мероприятий (с более чем 1000 участников), прошедших в период с 2015 по 2017 год	1. РФ, X Всероссийская конференция «Химия и медицина» с молодежной научной школой, 1-6 июня 2015 г. УфИХ УФИЦ РАН входил в число организаторов конференции, сотрудники входили в состав оргкомитета конференции. 2. РФ, V Всероссийская научно-практическая конференция «Практические аспекты нефтепромысловой химии», 20-21 мая 2015 г. УфИХ УФИЦ РАН входил в число организаторов конференции, сотрудники входили в состав оргкомитета конференции. 3. РФ, VI Международная научно-практическая конференция «Практические аспекты нефтепромысловой химии», 25-26 мая 2016 г. УфИХ УФИЦ РАН входил в число организаторов конференции, сотрудники входили в состав оргкомитета конференции. 4. РФ, VII Международная научно-практическая конференция «Практические аспекты нефтепромысловой химии», 24-25 мая 2017 г. УфИХ УФИЦ РАН входил в число организаторов конференции, сотрудники входили в состав оргкомитета конференции. 5. РФ. Всероссийская конференция по квантовой и математической химии. 13 - 17 ноября 2017 г. УфИХ

		УФИЦ РАН входил в число организаторов конференции, сотрудники входили в состав оргкомитета конференции.
12	Членство сотрудников организации в признанных международных академиях, обществах и профессиональных научных сообществах в период с 2015 по 2017 год	
ЭКСПЕРТНАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ ОРГАНИЗАЦИИ		
13	Участие сотрудников организации в экспертных сообществах в период с 2015 по 2017 год	Сотрудники ИФМК УФИЦ РАН выполняют следующие функции экспертов и рецензентов: 1. д.ф.-м.н. З.В. Гареева – рецензент журналов J. Physics:Condensed Matter, J.Physics D: Applied Physics, Physica status solidi: Rapid Research Letters; Physics A. 2. д.ф.-м.н., проф. Лачинов А.Н. является экспертом Федеральной научно-технической сферы Минобрнауки России, членом редколлегии журнала «Химия высоких энергий», «Известия УНЦ РАН», эксперт фонда РФФИ. УфИХ УФИЦ РАН: Академик РАН М.С.Юнусов - член редколлегии журнала "Химия природных соединений". Д.х.н., проф. Колосницын В.С.- член редколлегии журнала «Электрохимическая энергетика» - Д.х.н. Хурсан С.Л. - рецензент международного журнала International Journal of Chemical Kinetics. Д.х.н., проф. Г.Ю. Ишмуратов, д.х.н. проф. Ф.А.Валеев, д.х.н., проф. С.Л.Хурсан, д.х.н. Р.Л.Сафиуллин - члены редколлегии журнала «Бутлеровские сообщения». Академик РАН М.С.Юнусов, д.х.н., проф. С.Л.Хурсан, д.х.н., проф. С.В.Колесов, д.х.н., проф. А.Г.Мустафин - члены редколлегии журнала "Вестник Башкирского госуниверситета". К.х.н., д.с.-х.н. Н.М. Ишмуратова - член редколлегии журнала «Пчеловодство». Д.х.н., проф. Р.Р.Гатауллин– рецензент журнала «Химия гетероциклических соединений», д.х.н. М.С. Мифтахов - рецензент журнала «Mendeleev Communications». Д.х.н., проф. В.А. Докичев - член редколлегии научного журнала "Вестник Санкт-Петербургского

		университета" Серия 4. Физика. Химия; Д.х.н., проф. В.А. Докичев - федеральный эксперт - Федеральное государственное бюджетное научное учреждение Научно-исследовательский институт – Республиканский исследовательский научно-консультационный центр экспертизы; К.х.н., д.с.-х.н. Н.М. Ишмуратова - член Экспертно-консультативного совета Общественной палаты Республики Башкортостан, Эксперты РАН - д.х.н., проф. Кабальнова Н.Н., д.х.н., проф. Муринов Ю.И., д.х.н., проф. Хурсан С.Л., д.х.н., проф. Ф.А. Валеев Ф.А., д.х.н., проф. Г.Ю. Ишмуратов, д.х.н., проф. И.Б. Абдрахманов, к.х.н., д.с.-х.н. Н.М. Ишмуратова Эксперты РНФ, РФФИ - - д.х.н., проф. Муринов Ю.И., д.х.н., проф. Колосницын В.С., акад. РАН Юнусов М.С., д.х.н., проф. Балтина Л.А., д.х.н., проф. Мифтахов М.С., д.х.н., проф. Ф.А. Валеев Ф.А., д.х.н., проф. Гималова Ф.А. и др. К.х.н., д.с.-х.н. Н.М. Ишмуратова - член Технического совета при НИИ Пчеловодства (г. Рыбное Рязанской обл.) по стандартизации продуктов пчеловодства. Лаборатории биорегуляторов насекомых и физико-химических методов анализа УфИХ РАН по заданию НИИ Пчеловодства принимали участие в уточнении ГОСТ 28888-90 «Молочко маточное пчелиное» и ГОСТ 52680-2006 «Молочко маточное пчелиное адсорбированное», в разработке проекта ГОСТ Р «Молочко маточное пчелиное. Метод определения деценовых кислот»
14	Подготовка нормативно-технических документов международного, межгосударственного и национального значения, в том числе стандартов, норм, правил, технических регламентов и иных регулирующих документов, утвержденных федеральными органами исполнительной власти, международными и межгосударственными органами в период с 2015 по 2017 год	
ЗНАЧИМОСТЬ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ		

15	Значимость деятельности организации для социально-экономического развития соответствующего региона в период с 2015 по 2017 год	Результаты, полученные ИФМК УФИЦ РАН в 2015-2017 гг., позволили разработать научно-техническую программу по печатной электронике органических материалов, которая в 2017 году решением Правительства республики Башкортостан была включена в перечень Приоритетных проектов республики Башкортостан и двумя проектами вошла в региональную Программу Башкирская технологическая инициатива: «Научные исследования по созданию основ технологии производства печатной микроэлектроники на основе органических материалов» (рук. А.Н.Лачинов) и « Технология производства печатной микроэлектроники на основе органических материалов» (рук. А.Н.Лачинов). Уфимский институт химии УФИЦ РАН принимает активное участие в выполнении региональных научно-технических программ и проектов: 1. Грант Президента Республики Башкортостан молодым ученым и молодежным научным коллективам "Создание и исследование носителей лекарственных средств на основе водорастворимых полимеров N,N-диаллил-N,N-диметиламмоний хлорида", к.х.н. М.С. Бабаев (Договор №4 с АН РБ от 13.03.2015). 2. Грант Академии наук Республики Башкортостан (РФФИ 14-04-97035-поволжье-а) "Механизм комплексообразования азот-, кислород- и серусодержащих соединений с ферментами липоксигеназной окислительной системы и полисахаридами" д.х.н. С.Л. Хурсан. 3. Грант Президента Республики Башкортостан молодым ученым и молодежным научным коллективам "Азагетероциклические тритерпеноиды как новый класс противотуберкулезных агентов", к.х.н. Э.Ф. Хуснутдинова (Договор № 28 от 13.03.2015 г.). 4. Грант Президента Республики Башкортостан молодым ученым и молодежным научным коллективам " Новые N-содержащие реагенты в превращениях пероксидных продуктов озонолиза", к.х.н. Ю.В.Легостаева (Договор № 48 от 18.02.2016). 5. Грант Президента Республики Башкортостан молодым ученым и молодежным научным коллективам " Синтез высокоактивного против вируса гепатита В карбануклеозида Энтекавира", Ахметьянова В.А., Лобко И.Ф. (Договор № 1 с АН РБ, 2017 г.). 6. Грант Академии наук Республики Башкортостан

		(РФФИ 15-03-03101-поволжье) "Синтез и изучение нейротропной активности производных монотерпенового гликозида пеонифлорина как научная основа создания новых агентов для коррекции болезни Альцгеймера" д.х.н. Л.А. Балтина. 7. Грант Академии наук Республики Башкортостан (РФФИ 14-03-97049_р-поволжье) "Синтез Энтекавира и его аналогов" к.х.н. Н.С.Востриков. 8. Грант Академии наук Республики Башкортостан (РФФИ 14-03-97007-р_поволжье_а) "Развитие методологии синтеза хиральных соединений среднего и большого размеров цикла на основе левоглюкозенона в направлении омега-алкилированных лактонов и их трансаннулярные реакции в синтезе карбоциклических природных соединений и аналогов" д.х.н. Ф.А. Валеев. 9. Грант Академии наук Республики Башкортостан 40/25 от 05.06.17 " Альтернативный синтез 11-дезоксимизопростола и его дельта-2-аналога", к.х.н. Н.А.Иванова. 10. Грант Академии наук Республики Башкортостан 40/18 от 05.06.17 "Левоглюкозенон: хиральные растворители; синтезы биологически активных лактонов и карбоциклических соединений среднего и большого размеров", д.х.н. Ф.А. Валеев. 11. Грант Академии наук Республики Башкортостан 40/21 от 05.06.17 "Синтез новых противоопухолевых агентов на основе хинолизидиновых алкалоидов растений семейства Fabaceae, произрастающих в Республике Башкортостан", д.х.н. Ф.З.Галин. 12. Грант Академии наук Республики Башкортостан 40/22 от 05.06.17 "Синтез природных 15-дезокси-дельта(12,14)-простагландина J2, дельта(12)-простагландина J2, их энантиомеров и аналогов", к.х.н. А.М. Гимазетдинов.
ИННОВАЦИОННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ОРГАНИЗАЦИИ		
16	Инновационная деятельность организации в период с 2015 по 2017 год	У ИФМК УФИЦ РАН 2 проекта 1.«Научные исследования по созданию основ технологии производства печатной микроэлектроники на основе органических материалов» (рук. А.Н.Лачинов) 2.« Технология производства печатной микроэлектроники на основе органических материалов» (рук. А.Н.Лачинов) Вошли в перечень проектов Башкирской технологической инициативы в 2017 году.

		Планировалось выделить финансирование из регионального бюджета до 10 млн.руб. в год. Результаты, полученные в отчетный период послужили основанием для заключения четырех стороннего соглашения в 2018 году между ООО «Газпром трансгаз Уфа», Институтом физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфимским государственным авиационно-техническим университетом, Уфимским государственным нефтяным техническим университетом о «Программе совместных научно-технических исследований по определению возможности использования пленочных сенсорных покрытий для мониторинга технического состояния оборудования ООО «Газпром трансгаз Уфа». УфИХ УФИЦ РАН 1. В рамках выполнения госконтракта 14.N08.12.0013 в Институте в сотрудничестве с Башгосмедуниверситетом (г. Уфа) и ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН (г. Москва) создан препарат для акушерства и гинекологии на основе стероида и 11-дезоксимизопростола. 11-Дезоксимизопростол показал утеротоническую и абортивную активность, сравнимую с мизопростолом, используемым ныне в подобного типа препаратах. Кроме того, по сравнению с мизопростолом, 11-дезоксимизопростол синтетически легко доступен, химически более стабилен и в 2 раза менее токсичен. Оптимизирована технология выделения и очистки 11-дезоксимизопростола, что позволяет нарабатывать его в граммовых количествах. Разработана лекарственная форма. Завершены доклинические исследования. Разработан лабораторный регламент и ОПР для ФС и ЛС, проведены токсикологические исследования. (УфИХ РАН, руководитель работ: Мифтахов М.С., исполнители: Иванова Н.А., Сапожникова Т.А., Валиуллина З.Р. и др.). Период 2013-2015, объем финансирования 30 000 тыс. руб. на 3 года, ФЦП «Фарма-2020». Публикации: 1) Патент РФ № 2560555 «Способ получения (1Е)-1-три-н-бутилстаннил-4-метил-4-триметилсилоксиокт-1-ена» / Н.А. Иванова, З.Р. Валиуллина, Н.С. Востриков, М.С. Мифтахов. / Опубл. 20.08.2015, Бюл. изобр. № 23. 2) Патент РФ №2612005. Иванова Н.А., Сапожникова Т.А., Габдрахманова С.Ф., Зарудий Ф.С., Мифтахов М.С., Аглетдинов Э.Ф., Катаев В.А., Павлов В.Н.

		Средство, представляющее собой этиловый эфир (±)-11,15-дидезокси-16-метил-16-гидроксипростагландина Е1, проявляющее абортивную активность, оптимально, в сочетании с мифепристоном. Опубл. 01.03.2017, Бюлл. № 7. 3) Сапожникова, Т.А. / Т.А. Сапожникова, Ф.С. Зарудий, С.Ф. Габдрахманова, Р.Ю. Хисаутдинова, Н.С. Макара, Н.А. Иванова, М.С. Мифтахов, М.О. Баталова. Простагландины и мифепристон в стимуляции медикаментозного аборта // Экспериментальная и клиническая фармакология, 2017, Т. 80, №8, с.35-44. 4) Катаева Р.М., Аглетдинов Э.Ф., Иванова Н.А., Галимова Р.А., Булыгин К.В., Катаев В.В. Изучение репродуктивной токсичности перспективного нового лекарственного средства «11-дезоксимизопростол» // Современные проблемы науки и образования. – 2015, № 1 (ч.1). 2. В рамках выполнения госконтракта 14.N08.11.0068 в Институте в сотрудничестве с Башгосмедуниверситетом (г. Уфа) и НИИ фармакологии имени В.В. Закусова (г.Москва) создано новое антиаритмическое лекарственное средство на основе алкалоида лаппаконитина. Предлагаемое лекарственное средство представляет собой композицию лаппаконитина, глицирризиновой кислоты и метилурацила и предназначено для лечения различных видов аритмии у больных с отсутствием органических заболеваний сердца. Период 2015-2017, объем финансирования 33 000 тыс. руб. на 3 года, ФЦП «Фарма-2020». Инновационными свойствами заявляемой в качестве антиаритмического лекарственного средства фармацевтической комбинации являются: • снижение эффективной антиаритмической дозы (по сравнению с лаппаконитин гидробромидом), при сохраненной длительности действия, что позволит расширить область клинического применения препарата, и повысить комплайнс (приверженность) пациентов к лечению; • появление нового, не свойственного лаппаконитин гидробромиду, механизма антиаритмического действия – в отличие от прототипа заявляемая комбинация блокирует не только натриевые каналы, но и калиевые каналы, в силу чего ее можно отнести к антиаритмическим лекарственным средствам, потенциально обладающим свойствами антиаритмиков IA класса по классификации Vaughan Williams.

		В настоящее время УфИХ РАН совместно с НИИ фармакологии имени В.В. Закусова (г.Москва), БГМУ (г.Уфа), Московской фармацевтической фабрикой и Опытным производством ИХРВ АН Республики Узбекистан готовится досье для проведения клинических испытаний. Список публикаций и патентов: 1) Юнусов М.С., Муринов Ю.И., Цырлина Е.М., Юнусова С.Г., Габбасов Т.М. и др. (заявители и патентообладатели). Способ получения лаппаконитина гидробромида и лаппаконитина. Патент РФ № 2016132740; опубл. 23.01.2018, БИ .№ 3. 2) М. С. Юнусов, Ю. И. Муринов, Е. М Цырлина, С. Г. Юнусова Ф. С. Зарудий, С. Ф. Крыжановский, И. Б. Цорин. Антиаритмическое лекарственное средство. Патент РФ № 2664668, БИ № 24, от 21.08.2018; 3) Цорин И.Б., Зинченко В.П., Теплов И.Ю., Косенков А.М., Муринов Ю.И., Юнусов М.С., Крыжановский С.А. Изучение электрофизиологических механизмов действия соединения ЛМГ-124 // Фармакокинетика и фармакодинамика. - 2017. - №2. - С.4-11. 4) Столярук В.Н., Цорин И.Б., Вититнова М.Б., Никифорова Т.Д., Муринов Ю.И., Юнусов М.С., Крыжановский С.А. Сравнительное изучение антиаритмической активности лаппаконитина гидробромида и соединения ЛМГ-124 на модели аконитиновой аритмии // Фармакокинетика и фармакодинамика. - 2017. - №2. - С.12-15. 5) Столярук В.Н., Цорин И.Б., Вититнова М.Б., Гусев В.П., Муринов Ю.И., Юнусов М.С., Крыжановский С.А. Изучение противофибрилляторной активности соединения ЛМГ-124 и лаппаконитина гидробромида на модели реперфузионных аритмий у крыс // Фармакокинетика и фармакодинамика.-2017.-№2.-С.16-18. 3. С целью превращения пчеловодства в передовую отрасль сельского хозяйства Российской Федерации сформулировано и развито перспективное научное направление по созданию препаратов для пчеловодства и шмелеводства на основе синтетических полученных метаболитов – 9-оксо-2Е-деценовой и 10-гидрокси-2Е-деценовой кислот – основных компонентов «маточного вещества» и «маточного молочка», соответственно, включающее разработку эффективных путей их синтеза, исследование фармакологической активности и способов применения. Исследования по феромонам медоносных пчёл завершены внедрением в

		пчеловодную отрасль сельского хозяйства 7 запатентованных и сертифицированных экологически безопасных препаратов серий «Апимил» и «Аписил», соответствующих мировому уровню и даже превышающих его. Это роепривлекающий, успокаивающего действия и корректор летней активности медоносных пчёл в условиях защищенного грунта, а также оздоравливающие и стимулирующие композиции серии «Аписил». 4. Сотрудники Института участвовали в выполнении проекта Российского научного фонда "Создание высокотехнологичных методов и эффективных "зеленых" реагентов для разработки и эксплуатации нефтегазовых месторождений Крайнего Севера и Арктической зоны" № 14-33-00022 по научному приоритету "Комплексные научные исследования Арктической зоны" по приоритетному направлению деятельности Российского научного фонда «Проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований вновь создаваемыми научной организацией и вузом совместными научными лабораториями». 2014-2016 гг. 80,050 млн руб. совместно с УГАТУ (руков. д.х.н. Докичев В.А.). 5. Договор с ООО «СамараНИПИнефть» «Разработка и внесение изменений в ПСД Технологии утилизации отходов бурения на основе углесодержащего сорбента-деструктора с получением заключения государственной экологической экспертизы» 2017 г. 1,0 млн руб.

III. Блок сведений об инфраструктурном и внедренческом потенциале организации, партнерах, доходах от внедренческой и договорной деятельности
(ориентированный блок внешних экспертов)

п/п	Запрашиваемые сведения	Характеристика
ИНФРАСТРУКТУРА ОРГАНИЗАЦИИ		
17	Научно-исследовательская инфраструктура организации в период с 2015 по 2017 год	В ИФМК УФИЦ РАН разработан уникальный метод масс-спектрометрии резонансного захвата электронов и на его основе долгие годы широким фронтом ведутся фундаментальные исследования образования и распада отрицательных ионов (механизмы, свойства, энергетика) и поиск возможных приложений (биологическая активность лекарств, анализ микропримесей и др.). Для развития данного метода создан комплекс спектральных оборудования по изучению многоатомных молекул и ионов сложных органических соединений, включающих три масс-спектрометра МИ-1201В, переоборудованных для работы с отрицательными ионами в режиме резонансного захвата электронов, Хромато-масс спектрометр «Хроматек-Кристалл ГХ-МС» (Хроматек, Россия), Фотоэлектронный спектрометр ЭС-3201, УФ-спектрофотометры UV 2401/2501 и UV 3600 (Shimadzu, Япония), Спектрофлуориметр RF-5301PC (Shimadzu, Япония), а также Инфракрасный Фурье спектрометр Tensor 27 (Bruker, Германия) и спектрометр электронного парамагнитного резонанса EMX (Bruker, Германия). Три масс-спектрометра входят в состав УНУ «Масс-спектрометры отрицательных ионов резонансного захвата электронов» (рег. номер). А все остальные приборы составляют ЦКП ИФМК УФИЦ РАН «Спектр» (рег.номер 353408). Кроме того, в состав ЦКП «Спектр» включено другое дорогостоящее высокотехнологичное оборудование. Это прежде всего оборудование для структурного анализа – оптические микроскопы Axio Imager A1 и Axio Observer.Z1 (Carl Zeiss, Germany), Стереомикроскоп Stemi 2000 (Carl Zeiss, Germany), Рентгеновский дифрактометр D8 Advance (Bruker, Германия), а также Дифференциальный сканирующий калориметр Diamond (Perkin-Elmer, USA), Оптический тензометр Attension Theta (Attension, USA) Зарегистрировани уникальная научная установка "Масс-спектрометр для исследования отрицательных ионов, образующихся при резонансном захвате электронов" Регистрационный номер УНУ на портале: 353466. В УфИХ УФИЦ РАН работает Центр коллективного

		пользования «Химия», услугами которого активно пользуются сотрудники других институтов и вузов Уфы. ЦКП «Химия» был создан 11 января 2011 г. с целью интенсификации научных исследований в области органической и биоорганической химии, химии высокомолекулярных соединений, физической химии, а также для эффективного использования дорогостоящего современного научного оборудования при выполнении совместных научно-исследовательских и хоздоговорных работ. ЦКП «Химия» УфИХ РАН включает следующее дорогостоящее высокотехнологичное обрудование: ЯМР спектрометр высокого разрешения Avance III 500 MHz (Bruker, Германия), газовый хроматомасс-спектрометр MAT-95 (Finigan, США), гель-хроматограф с рефрактометрическим детектором Alliance apc 2000 Systems (Waters, США), жидкостной хроматомасс спектрометр с квадрупольным детектором LCMS-2010 (Shimadzu, Япония), кластерный суперкомпьютер УфИХ РАН (Sun, США), ИК-Фурье спектрометры Prestige (Shimadzu, Япония) и Tenzor (Bruker, Германия), поляриметр 341 (Perkin Elmer, США); жидкостные хроматографы с диодно-матричным и рефрактометрическим детекторами (Shimadzu, Япония), со спектрофотометрическим детектором Breeze (Waters, США), YL-9100 и Acme9000 (Younglin Instruments, Республика Корея), спектрофлуориметр СМ2203 (Солар, Белоруссия); газовые хроматографы с детекторами ПИД и ДТП GC-2014 (Shimadzu, Япония) и Хромос-1000 (Химаналитсервис, РФ), элементный анализатор CHNS(O) Euro3000 (Hekatech, Германия), лазерный дифракционный анализатор размера частиц SALD-7101 (Shimadzu, Япония), UV-Vis спектрофотометр UV-1800 (Shimadzu, Япония), атомно-абсорбционный спектрометр SensAA (GBC, Австралия). Общее количество анализов на оборудовании ЦКП «Химия» УфИХ РАН составило в 2015-2017 гг. более 50 тыс.
18	Показатели деятельности организаций по хранению и приумножению предметной базы научных исследований в период с 2015 по 2017 год	
ДОЛГОСРОЧНЫЕ ПАРТНЕРЫ ОРГАНИЗАЦИИ		

19	Стратегическое развитие организации в период с 2015 по 2017 год.	Зарубежные партнеры ИФМК УФИЦ РАН: Болонский университет(Болонья, Италия),Университет Коменского (Братислава, Словакия), Университет Небраски (Линкольн, США), Пражский университет (Прага, Чехия), Университет Седлице (Седлице, Польша), Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета (Минск, Беларусь), Университет Байройта(Bayreuth University, Bayreuth Germany), Институт динамики и самоорганизации Макса Планка (Max Plank Institute of dynamic sandself-organization, Göttingen, Germany), Институт физики твердого тела Венгерской Академии наук(Institute of solidstate physics and optics of Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Hungary), Университет науки и технологииГонконга(HongKongUniversityofSciencea ndTechnology,HongKong,China), Университет земли Басков(Сан Себастьян,Испания-DepartamentodeFísicadeMateriales Universidad del País Vasco, UPV/EHU), Институт материаловедения (IMDEA Materials Institute, Madrid, Spain), Институт физики материалов Университета Мюнстера (Institute forMaterialsPhysics,UniversityofMunster,Germany),Институтнанотехнологий,Технологический институт Карлсруэ, Германия (Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology, Germany), Орегонский университет (США, г. Корваллис, Oregon StateUniversity). Российские партнеры ИФМК УФИЦ РАН: Санкт-Петербургский Государственный университет (Санкт-Петербург), Тихоокеанский Институт биоорганической химии (Владивосток), Институт спектроскопии РАН(Троицк),Институт энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе РАН (Москва), Институт общей физики им. Прохорова РАН (Москва), Национальный исследовательский университет МИЭТ (Зеленоград, Москва), Пермский государственный национальный исследовательский университет(Пермь),Уфимский государственный авиационный технический университет(Уфа),Национальныйисследовательский технологическийуниверситет«МИСиС», (Москва),Институт физики металлов УрОРАН, (Екатеринбург),химический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (лаборатория термохимии), Военная академия РХБ защиты имени Маршала Советского Союза С.К. Тимошенко (г. Кострома, по договору о сотрудничестве).

		Стратегические цели УфИХ УФИЦ РАН: развитие фундаментальных и прикладных исследований в области органической, медицинской, физической химии, химии высокомолекулярных соединений, направленных на обеспечение эффективности и результативности работ в области разработки новых конкурентоспособных продуктов для промышленности, защиты окружающей среды, изучения источников, структуры и свойств биологически активных соединений с перспективой создания на их основе препаратов для медицины и сельского хозяйства, разработки новых биологически активных веществ и ма/териалов для решения задач безопасности жизнедеятельности и импортозамещения. Стратегические цели УфИХ УФИЦ РАН: развитие фундаментальных и прикладных исследований в области органической, медицинской, физической химии, химии высокомолекулярных соединений, направленных на обеспечение эффективности и результативности работ в области разработки новых конкурентоспособных продуктов для промышленности, защиты окружающей среды, изучения источников, структуры и свойств биологически активных соединений с перспективой создания на их основе препаратов для медицины и сельского хозяйства, разработки новых биологически активных веществ и материалов для решения задач безопасности жизнедеятельности и импортозамещения. УфИХ УФИЦ РАН активно и успешно сотрудничает с известными научно-исследовательскими организациями и вузами страны и республики: ФГБОУ ВО Башкирский государственный университет (БГУ); Бирский филиал Башкирского государственного университета, ФГБОУ ВО Башкирский государственный медицинский университет Минздрава России (БГМУ); ФБУН «Уфимский НИИ медицины труда и экологии человека» (УфНИИ МТ и ЭЧ); ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет» (УГНТУ); ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет» (УГАТУ); ФГБОУ ВО Башкирский государственный аграрный университет (БГАУ); Сибирский государственный медицинский университет (СибГМУ) (г. Томск); Филиал Московского государственного университета технологий и управления имени К.Г. Разумовского

		(г. Мелеуз); Московская государственная академия ветеринарной медицины и биотехнологии им. К.И.Скрябина; НИИ пчеловодства (г. Рыбное Рязанской области); ВНИИ табака, махорки и табачных изделий (г. Краснодар); ФГБУ «Федеральный центр токсикологической, радиационной и биологической безопасности» (г. Казань); ИОХ РАН им. Н.Д.Зелинского; ИНЭОС РАН им. А.Н.Несмеянова; ФГБНУ НИИ фармакологии РАН им. В.В. Закусова (г. Москва); Казанский ИОФХ; КГЭУ (г. Казань); НИИ гриппа (г. С.-Петербург); Институт глазных болезней (г.Уфа); НК «Роснефть»; University of Cambridge, Department of Materials Science & Metallurgy, Materials Chemistry Research Group (UK); Istanbul Technical University, Faculty of Chemical and Metallurgical Engineering, Department of Metallurgical and Materials Engineering (Турецкая Республика); Xi'an University of Technology (Китайская народная республика); Sigma Lithium Ltd. (UK); LG Chem Ltd. (Republic of Korea); Институт химии растительных веществ при АН Республики Узбекистан и др.
РИД И ПУБЛИКАЦИИ ОРГАНИЗАЦИИ		
20	Количество созданных результатов интеллектуальной деятельности, имеющих государственную регистрацию и (или) правовую охрану в Российской Федерации или за ее пределами, а также количество выпущенной конструкторской и технологической документации в период с 2015 по 2017 год, ед.	2015 г. – 11 2016 г. – 5 2017 г. – 14
21	Объем доходов от использования результатов интеллектуальной деятельности в период с 2015 по 2017 год, тыс. руб.	2015 г. – 0.000 2016 г. – 0.000 2017 г. – 0.000
22	Совокупный доход малых инновационных предприятий в период с 2015 по 2017 год, тыс. руб.	2015 г. – 0.000 2016 г. – 0.000 2017 г. – 0.000

23	Число опубликованных произведений и публикаций, индексируемых в международных информационно-аналитических системах научного цитирования в период с 2015 по 2017 год, ед.	2015 г. – 299 2016 г. – 209 2017 г. – 260
ПРИВЛЕЧЕННОЕ ФИНАНСИРОВАНИЕ		
24	Гранты на проведение исследований Российского фонда фундаментальных исследований, Российского научного фонда и др. источников в период с 2015 по 2017 год.	Всего 26 грантов. У ИФМК УФИЦ РАН всего грантов РФФИ - 13 в том числе: 1. РФФИ № 14-02-97028-р_поволжье_а "Электронные свойства полициклических ароматических углеводородов в свете низкоэнергетических электронно-молекулярных взаимодействий" (2014 – 2016 гг). Руководитель д.ф.-м.н. М.В. Муфтахов. (600 000,00 руб) 2. РФФИ № 15-02-09366-а "Механизмы образования и динамика нестационарных электроконвективных структур в жидких кристаллах: синхронизация, роль флексоэффекта и границ" (2015 – 2017 гг). Руководитель д.ф.-м.н., снс В.А. Делев. (1 394 000,00 руб) 3. РФФИ № 16-02-00336-а "Магнитоэлектрическое управление микромагнитными структурами в пленках оксидных мультиферроиков" (2016 – 2018 гг). Руководитель З.В. Гареева (830 000,00 руб) 4. РФФИ № 16-08-00384-а "Электронно-индуцированные низкоэнергетические процессы в соединениях, перспективных для биомолекулярной электроники" (2016 – 2018 гг). Руководитель М.В. Муфтахов (900 000,00 рублей) 5. РФФИ № 17-42-020643/17 «Стабильность циклических молекулярных систем в процессах взаимодействия с низкоэнергетическими электронами» (2017 – 2019 гг.). Руководитель М.В. Муфтахов (600 000,00 рублей) У УфИХ УФИЦ РАН 37 грантов, наиболее значимые из них: 6. РНФ 16-15-00141 "Создание стимуляторов посттравматической регенерации тканей на основе производных пиримидин-4-она для разработки отечественного инновационного лекарственного препарата" д.х.н. Ю.И.Муринов. 21.01.16-31.12.18. 15654403,0 руб.

		7. РНФ 15-13-00039 "Модифицированные карбапенемы, небелковые аминокислоты и их конъюгаты" Д.х.н. М.С. Мифтахов. 04.06.15-31.12.17. 14 922 893,7 руб. 8. РНФ 14-13-01307 "Дизайн, синтез и изучение зависимости структура-противовирусная активность производных природных тритерпеноидов и гетероциклов как противогриппозных агентов" академик РАН М.С. Юнусов. 02.07.14-31.12.16. 15 000 000 руб. 9. РФФИ 16-29-06190 " Разработка и исследования новых материалов на основе графена и его функционализированных производных для литий-серных аккумуляторов с высокой удельной энергией и мощностью " к.х.н. Е.В.Карасева. 2016-2019 гг. 5020000,00 руб. 10. РФФИ 16-33-60119 "Структурно-кинетический континуум в процессах формирования макромолекул карбоцепных полимеров под действием гомогенных и гетерогенных катализаторов с контролируемым образованием активных центров" д.х.н. В.З. Мингалеев. 03.12.15-31.12.18. 6000000,00 руб. 11. РФФИ 16-33-60204 "Синтез новых аминопропаргильных и гетероциклических производных с цитотоксической активностью с использованием Cu(I)-Катализируемых реакций Манниха и 1,3-диполярного циклоприсоединения азидов к пентациклическим алкинилтритерпеноидам" К.х.н. Э.Ф. Хуснутдинова. 03.12.15-31.12.18. 5 100 000 руб.
25	Перечень наиболее значимых научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ и услуг, выполненных по договорам (в том числе по госконтрактам с привлечением бизнес-партнеров) в период с 2015 по 2017 год	УфИХ УФИЦ РАН 1. Государственный контракт № 14.N08.12.0013 от 23.04.2013 г. по теме: "Доклинические исследования нового простагландинового препарата для акушерства и гинекологии" (шифр 2013-2.5-14-N08-0004-002). Оптимизирована технология выделения и очистки 11-дезоксимизопростола, что позволяет нарабатывать его в граммовых количествах. Разработана лекарственная форма. Завершены доклинические исследования. Разработан лабораторный и опытно-промышленный регламент для ФС и ЛС, проведены токсикологические исследования. 2. Государственный контракт № 14.N08.11.0068 от 02.12.2015 г. по теме: "Доклинические исследования нового антиаритмического лекарственного средства на основе алкалоида лаппаконитина" (шифр 2015-14-N08-007). 3. «Разработка гелеобразующего состава с

		регулируемыми сроками гелеобразования на основе реагента Реаком-С для ограничения водопритока в нефтяные скважины». Договор с ООО Научно-производственный центр «Комплекс-Ойл» (Уфа), 2015 г. Сумма договора 300 тыс. рб. УфИХ РАН разработан реагент (Реаком-С) для газо- и нефтедобычи. Реагент предназначен для обработки буровых растворов и в качестве основы для осадко- и гелеобразующих составов для повышения нефтеотдачи неоднородных по проницаемости пластов за счет изоляции или ограничения водопритока в скважины. Реагент представляет собой водный раствор сополимера, образующегося при гидролизе полиакрилонитрильного сырья жидким натриевым стеклом. Работами по договору показано, что вследствие повышенного содержания соединений кремния реагент Реаком-С способен к образованию гидрогелей при взаимодействии с раствором соляной кислоты без дополнительного введения жидкого натриевого стекла. Образование гелей со 100 % степенью набухания происходит за время, укладывающееся в практически приемлемый интервал 4-24 часа. В качестве добавки, выступающей в роли модификатора процесса гелеобразования предложены растворы карбамида 10-25 масс. % концентрации, быстро стимулирующие образование достаточно прочных гидрогелей. 4. Договор с ООО «СамараНИПИнефть» «Разработка и внесение изменений в ПСД Технологии утилизации отходов бурения на основе углесодержащего сорбента-деструктора с получением заключения государственной экологической экспертизы» 2017 г. Разработана и внедрена технология «Утилизация отходов бурения на основе углесодержащего сорбента-деструктора». Для реализации технологии создан углерод-кремнеземный сорбент-деструктор СД-1 и организовано его производство.
26	Доля внебюджетного финансирования в общем финансировании организации в период с 2015 по 2017 год,	0.41700
26.1	Объем выполненных работ, оказанных услуг (исследования и разработки, научно-технические услуги, доходы от использования	2015 г. – 185388.500 2016 г. – 160896.600 2017 г. – 162953.100

	результатов интеллектуальной деятельности), тыс. руб.	
26.2	Объем доходов от конкурсного финансирования, тыс. руб.	2015 г. – 39096.900 2016 г. – 22962.400 2017 г. – 18703.300
УЧАСТИЕ ОРГАНИЗАЦИИ В ЗНАЧИМЫХ ПРОГРАММАХ И ПРОЕКТАХ		
27	Участие организации в федеральных научно-технических программах, комплексных научно-технических программах и проектах полного инновационного цикла в период с 2015 по 2017 год.	УфИХ УФИЦ РАН 1. Федеральная целевая научно-технические программа «Развитие фармацевтической и медицинской промышленности Российской Федерации на период до 2020 года и дальнейшую перспективу», Проект «Доклинические исследования нового антиаритмического лекарственного средства на основе алкалоида лаппаконитина», руководитель: академик РАН М.С.Юнусов, ответственный исполнитель д.х.н. Ю.И. Муринов. 33 000 000 руб. 2. Федеральная целевая научно-технические программа «Развитие фармацевтической и медицинской промышленности Российской Федерации на период до 2020 года и дальнейшую перспективу», Проект «Доклинические исследования нового простагландинового препарата для акушерства и гинекологии» (2013-2015 гг.), руководитель: д.х.н., проф. М.С. Мифтахов. 30 000 000 руб.
ВНЕДРЕНЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ОРГАНИЗАЦИИ		
28	Наличие современной технологической инфраструктуры для прикладных исследований в период с 2015 по 2017 год.	
29	Перечень наиболее значимых разработок организации, которые были внедрены в период с 2015 по 2017 год	1. Название разработки: Цитостатический гидрогель на основе модифицированных гиалуроновой кислоты и хитозана для офтальмологии Аннотация разработки: Для использования при оперативном лечении глаукомы разработан дренаж

		из гидрогеля на основе модифицированных биогенных полимеров - гиалуроновой кислоты и хитозана, содержащий цитостатик - митомицин С. Использование предложенного дренажа позволяет добиться устойчивой фильтрации внутриглазной жидкости, нормализует внутриглазное давление, не травмирует внутренней биологической поверхности, способствуя снятию воспаления и болевого синдрома. Полимерный дренаж обладает высокой биосовместимостью и способностью к биорезорбции, его использование приводит к уменьшению токсического эффекта цитостатика и стабилизации внутриглазного давления в течение длительного времени после операции. Степень готовности разработки к практическому применению: проведены испытания на лабораторных животных с положительным результатом. Возможный технический и (или) экономический эффект от внедрения: уменьшение токсического эффекта цитостатика и стабилизация внутриглазного давления в течение длительного времени после операции. Организация-разработчик: УфИХ РАН Организация внедрения: Уфимский НИИ глазных болезней АН РБ 2. Название разработки: «Глазная лекарственная пленка с моксифлоксацином». Аннотация разработки: Глазная лекарственная пленка на основе поливинилового спирта, дигидрокверцетина и моксифлоксацина. Иммобилизация моксифлоксацина в пленках приводит к выраженному пролонгированию (в 1,5-2 раза) действия лекарственного соединения и в значительной степени повышает проникновение препарата в ткани и жидкости глаз, обеспечивая необходимую терапевтическую концентрацию. Введение флавоноида расширяет спектр лечебного действия пленки за счет выраженных антиоксидантных, иммуномодулирующих свойств. Области возможного использования: методы профилактики инфекционных воспалительных осложнений в офтальмохирургии. Степень готовности разработки к практическому применению: проведены лабораторные и клинические испытания. Возможный технический и (или) экономический эффект от внедрения: расширение спектра лечебного действия пленки за счет придания ей иммуномодулирующих и антиоксидантных свойств, пролонгированное

		действие. Получено положительное решение о выдаче патента на изобретение № 2015104245 от 09.02.2015 «Глазная лекарственная пленка с моксифлоксацином». Организация-разработчик: УфИХ РАН Организация внедрения: Уфимский НИИ глазных болезней АН РБ 3. Название разработки: Электрохимический калориметр Для изучения тепловых эффектов процессов, протекающих в литий-серных аккумуляторах при их заряде, разряде и хранении, а также для исследования механизмов электрохимического осаждения лития разработан и изготовлен электрохимический калориметр. В составе прибора имеется модуль потенциостата-гальваностата, что позволяет синхронно проводить электрохимические и калориметрические измерения и повышает информативность эксперимента. Программное обеспечение содержит процедуры обработки данных с использованием фильтров деконволюции, позволяющие скомпенсировать инерционность измерителя теплового потока. Управление прибором и доступ к экспериментальным данным осуществляется удаленно по сети Ethernet. Абсолютная погрешность измерения теплового потока составляет ±50 мкВт при разрешающей способности 1 мкВт. Максимальная сила зарядно-разрядного тока встроенного гальваностата ±100 мА при максимальном поляризующем напряжении ±10 В. Исследования возможно проводить в температурном диапазоне 0–90 °С.[Калориметр теплового потока для исследования химических источников тока / Мочалов С.Э., Нургалиев А.Р., Кузьмина Е.В., Колосницын В.С. // «Научное приборостроение». - 2015. - Т. 25, № 2. - С. 45-52]. Организация-разработчик: УфИХ РАН Организация внедрения: Промышленность, научно-исследовательские институты, образовательные учреждения. 4. Название разработки: Вакуумный гравиметрический анализатор Для синтеза и определения состава сольватных комплексов полисульфидов лития разработан и изготовлен автоматический вакуумный гравиметрический анализатор с термостабилизацией взвешиваемого образца. Устройство управляется и обменивается данными с

		персональным компьютером по USB. Пользовательское программное обеспечение работает под операционной системой OS Windows. Организация-разработчик: УфИХ РАН Организация внедрения: Промышленность, научно-исследовательские институты, образовательные учреждения. 5. Название разработки: Ячейка для электронной микроскопии Для исследования механизмов электрохимического осаждения лития методом ex-situ сканирующей электронной спектроскопии разработана оригинальная вакуумная ячейка, позволяющая переносить исследуемый образец из перчаточного бокса в камеру микроскопа без контакта с окружающей атмосферой. [On the Processes on the Lithium Electrode in Lithium-Sulfur Batteries / V. Kolosnitsyn, E. Kuzmina, E. Karaseva, A. Ivanov, V. Kumar // 2015 - Sustainable Industrial Processing Summit & Exhibition, 4-9 October 2015, Antalya, Turkey]. Организация-разработчик: УфИХ РАН Организация внедрения: Промышленность, научно-исследовательские институты, образовательные учреждения. 6. Название разработки: Электрохимический дилатометр Для оценки изменения толщины электродов электрохимических ячеек в процессе их поляризации разработано специальное оборудование (дилатометрическая ячейка и гальваностат–потенциостат с дополнительным каналом регистрации сигнала с дилатометра) и программное обеспечение. Разработанный метод электрохимической дилатометрии продемонстрирован на примере исследований процессов дендритообразования на литиевом электроде. Исследования показали, что метод электрохимической дилатометрии является более информативным и чувствительным к изменениям, происходящим на поверхности литиевого электрода, по сравнению с методом циклической хронопотенциометрии и пригоден для ранней идентификации образования мелкодисперсных (дендритных) осадков лития. [On some features of cycling lithium electrode in lithium-sulfur batteries / V. Kolosnitsyn, E. Kuzmina, E. Karaseva, A. Ivanov, R.V. Kumar, C. Gao, K. Xi // 3rd Dresden Conference

		«Energy in Future» & 4th Workshop «Lithium-Sulfur Batteries», November 10-11, 2015, Dresden, Germany. - P 132]. Организация-разработчик: УфИХ РАН Организация внедрения: Промышленность, научно-исследовательские институты, образовательные учреждения. 7. Название разработки: Многоканальный гальваностат–потенциостат (Батарейный тестер) Для исследования электрохимической активности активных материалов положительных и отрицательных электродов литий-серных (сольватов полисульфидов лития различного состава и строения, серы, металлического лития)и литий-ионных ячеек (фосфатов лития железа, фосфатов лития ванадия, графита) разработан автоматизированный многоканальныйгальваностат–потенциостат (батарейный тестер) и программное обеспечение.Управление прибором и доступ к экспериментальным данным осуществляется удаленно по сети Ethernet.[Многоканальный потенциостат-гальваностат для циклических испытаний аккумуляторов и электрохимических ячеек / Мочалов С.Э., Антипин А.В., Нургалиев А.Р., Колосницын В.С. // Электрохимическая энергетика. – 2015. Т. 15, № 1. -С. 45-50.] Организация-разработчик: УфИХ РАН Организация внедрения: Промышленность, научно-исследовательские институты, образовательные учреждения. 8. Название разработки: Новый простагландиновый препарат для акушерства и гинекологии на основе 11-дезоксимизопростола Цель разработки - создание нового эффективного и дешевого отечественного аналога комбинированных препаратов (стероид + простагландин) для акушерства и гинекологии для медикаментозного прерывания беременности на ранних сроках с использованием в качестве простагландиновой компоненты впервые синтезированного в УфИХ 11-дезоксимизопростола. В качестве стероидной компоненты предполагается использовать мифепристон, оригинальный химический синтез которого разработан в ИОХ РАН (г. Москва). 11-Дезоксимизопростол показал утеротоническую и абортивную активность, сравнимую с мизопростолом, используемым ныне в подобного типа препаратах. Кроме того, по сравнению с

		мизопростолом, 11-дезоксимизопростол синтетически легко доступен, химически более стабилен и в 2 раза менее токсичен. Оптимизированная технология выделения и очистки 11-дезоксимизопростола позволяет нарабатывать его в граммовых количествах. Разработана лекарственная форма. Проведены доклинические исследования по ФЦП "Фарма-2020" в рамках выполнения госконтракта №14.N08.12.0013 с Минобрнауки. Организация-разработчик: УфИХ УФИЦ РАН Бизнес-партнер: ЗАО Пенкрофт Фарма (г. Москва). 9. Название разработки: Создание препарата для сохранения урожая сырья и семенной продукции табака Для сохранения запланированного урожая сырья и семенной продукции табака от актуального многоядного фитофага – хлопковой совки предлагается биологизированная система защиты культуры, основанная на методе массового отлова самцов вредителя («самцовый вакуум») в интеграции с биологическими препаратами. Предлагаемая система совместима с технологией получения семян на коллекционных и селекционных участках табака, подразумевающей изоляцию соцветий. В результате исследований установлено, что регулярный (ежегодный) массовый отлов самцов хлопковой совки на 4-ый год применения существенно снижает ее численность. Для повышения эффективности метода элиминации в первые годы реализации целесообразно при численности 10-15 отловленных за неделю бабочек на гектаре посадок табака проводить обработки соцветий биопрепаратами на основе вируса ядерного полиэдроза хлопковой совки ФермоВирин ХС (при норме расхода 4,0 г/га) или Хеликовекс (0,2 л/га). Трехкратная обработка биоинсектицидами способствует снижению численности гусениц хлопковой совки на растениях без изоляторов в среднем на 72-83%, поврежденности семенных коробочек на 73-75%. Применение препаратов по соцветиям табака с последующей их изоляцией снижает численность вредителя на 65-79%, поврежденность генеративных органов на 68-70%. Предлагаемая система может быть использована для биологического контроля хлопковой совки на других сельскохозяйственных культурах, повреждаемых этим вредителем, в первую очередь в хозяйствах органического земледелия, где

		применение химических препаратов строго регламентировано. Организация-разработчик: УфИХ УФИЦ РАН Партнер: ВНИИ табака, махорки и табачных изделий (г. Краснодар) 10. Название разработки: Новое антиаритмическое лекарственное средство на основе алкалоида лаппаконитина Объект доклинических исследований - антиаритмическое лекарственное средство на основе алкалоида лаппаконитина, представляет собой фармацевтическую комбинацию, включающую лаппаконитин, глицциризиновую кислоту и метилурацил при мольном соотношении компонентов лаппаконитин:глициризиновая кислота:метилурацил равном 1:4:2. Инновационными свойствами заявляемой в качестве антиаритмического лекарственного средства фармацевтической комбинации являются: • снижение эффективной антиаритмической дозы (по сравнению с лаппаконитин гидробромидом), при сохраненной длительности действия, что позволит расширить область клинического применения препарата, и повысить комплайнс (приверженность) пациентов к лечению; • появление нового, не свойственного лаппаконитин гидробромиду, механизма антиаритмического действия – в отличие от прототипа заявляемая комбинация блокирует не только натриевые каналы, но и калиевые каналы, в силу чего ее можно отнести к антиаритмическим лекарственным средствам, потенциально обладающим свойствами антиаритмиков IA класса по классификации Vaughan Williams. В настоящее время УфИХ РАН совместно с НИИ фармакологии имени В.В. Закусова (г.Москва), БГМУ (г.Уфа), Московской фармацевтической фабрикой и Опытным производством ИХРВ АН Республики Узбекистан готовится досье для проведения клинических испытаний. Организация внедрения: Московская фармацевтическая фабрика; Опытное производство ИХРВ при АН Республики Узбекистан. 11. Название разработки: Технология синтеза 5-гидрокси-6-метилурацила – субстанции лекарственного препарата «Оксиметилурацил» (Иммурег) Цель разработки: освоение крупномасштабного

		производства 5-гидрокси-6-метилурацила и налаживание выпуска на его основе лекарственного препарата для нужд Башкортостана и России. Препарат «Оксиметилурацил» (Иммурег) – известный иммуностимулятор с широким спектром фармакологических свойств: антиоксидантное, антитоксическое, противовоспалительное, кардиотоническое и др. Однако широкому использованию «Оксиметилурацила» в медицинской практике в настоящее время препятствует отсутствие налаженного производства субстанции, а также устаревшая технология ее получения с низким суммарным выходом целевого продукта (25%). Предложена практичная схема синтеза, позволяющая в две стадии, окислением 6-метилурацила смесью окислителей с последующим кислотным гидролизом образующегося промежуточного продукта, получить целевой 5-гидрокси-6-метилурацил с общим выходом до 80%. Разработан лабораторный регламент. Организация разработчик: УфИХ УФИЦ РАН Организация внедрения: ОАО «Фармстандарт-Уфавита» (г. Уфа) 12. Название разработки: «Утилизация отходов бурения на основе углесодержащего сорбента-деструктора». Разработана и внедрена технология «Утилизация отходов бурения на основе углесодержащего сорбента-деструктора». Для реализации технологии создан углерод-кремнеземный сорбент-деструктор СД-1 и организовано его производство. Технология прошла Государственную экологическую экспертизу и успешно зарекомендовала себя при строительстве нефтегазовых скважин и очистке нефтезагрязненных земель Республики Башкортостан и Самарской области. Наработано 2302,2 тонн сорбента-деструктора. Утилизировано (переработано) 236904,8 тонн бурового шлама. Возвращено в сельхозоборот ~295,4 га земель. Бизнес-партнер – ПАО «Самаранефтегаз» («Роснефть»). 13. Создан высокоэффективный палладиевый катализатор, который внедрен на ОАО «Редкинский опытный завод» в технологии циклопропанирования непредельных углеводородов».

30	Участие организации в разработке и производстве продукции двойного назначения (не составляющих государственную тайну) в период с 2015 по 2017 год	

IV. Блок дополнительных сведений

ДРУГИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ОРГАНИЗАЦИИ

31	Любые дополнительные сведения организации о своей деятельности в период с 2015 по 2017 год	Сотрудниками УфИХ УФИЦ РАН за 2015-2017 гг. получены следующие награды: Диплом в номинации «100 лучших изобретений России - 2015» - авторы: Балтина Лидия Ашрафовна, Балтина Лия Александровна, Зарубаев Владимир Викторович, Киселев Олег Иванович, Юнусов Марат Сабирович за разработку «Средство, представляющее собой амид глицирризиновой кислоты с 5-аминоурацилом, проявляющее противовирусную активность в отношении вируса гриппа A/H1N1». Орден Салавата Юлаева - д.х.н., проф. И.Б. Абдрахманов (награжден в декабре 2016 г.). Почетная грамота Российской академии наук и Профсоюза Российской академии наук - к.х.н. Г.Ф.Вафина, к.х.н. С.А.Торосян. Диплом за 1 место Конкурса на лучшую научную работу молодых ученых ВУЗов и научных учреждений Республики Башкортостан в номинации «Химические науки» – к.х.н. Выдрина В.А., асп. Кравченко А.А. Диплом II степени РХО им. Д.И. Менделеева за лучшие работы Всероссийской конференции «Достижения молодых ученых: химические науки». Уфа, май 2015 г. – Асп. Диниахметова Д.Р. Почетная грамота за I место в конкурсе работ, представленных на III Всероссийской научно-практической конференции «Новые материалы, химические технологии и реагенты для промышленности, медицины и сельского хозяйства на основе нефтехимического и возобновляемого сырья» 9-11 ноября 2015 г., г.Уфа. – М.н.с. Вильданова Р.Р. Диплом III место в рамках конкурса «Science-Slam» Междисциплинарной школы молодых ученых, г. Уфа, 22 мая 2015. – К.х.н., м.н.с. Бабаев М.С. Диплом за лучшую работу за доклад на Международной конференции: «Ломоносов-2015», г. Москва. – К.х.н., м.н.с. Бабаев М.С. Диплом за лучший доклад на Третьем междисциплинарном молодежном научном форуме с международным участием «Новые материалы». Москва 21-24 ноября 2017г. - аспирант Фахреева А.В. Д.х.н., проф. Колосницын В.С., к.х.н. Кузьмина Е.В., к.х.н. Карасева Е.В. - члены электрохимического общества The Electrochemical Society, http://www.electrochem.org/ - К.х.н. Кузьмина Е.В. - Член международного электрохимического общества International Society

		of Electrochemistry, https://www.ise-online.org/ - Д.х.н., проф. Колосницын В.С. - Член организационного комитета Международной конференции «Фундаментальные проблемы преобразования энергии в литиевых электрохимических системах» - Д.х.н., проф. В.А. Докичев - председатель оргкомитета международной научно-технической конференции «Практические аспекты нефтепромысловой химии». 2015-2017 гг. Абдрахманов И.Б. является председателем Башкортостанского отделения Российского химического общества им. Д.И. Менделеева, член Президиума РХО Д.И. Менделеева, член Президиума РХО.

Руководитель организации *ВРИО Председателя* **Р.Р. Ахунов**

(должность) (личная подпись) (расшифровка подписи)

М.П.