

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

The Journal is published in Russian and English.

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

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

### Содержание

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

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

### Обзоры

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

И. В. Свитанько, Т. С. Пивина

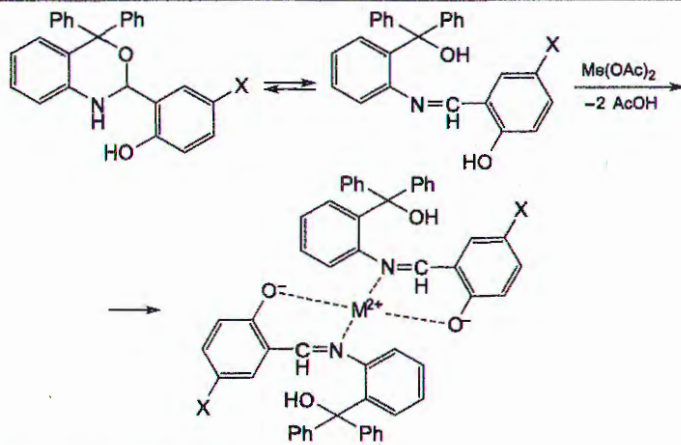


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1093

QSAR — количественная связь структура—свойство.

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

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

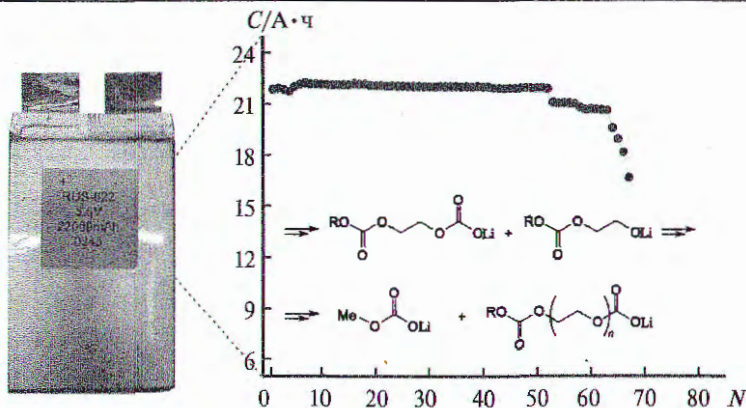


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1109

### Полные статьи

Химические аспекты деградации литий-ионного аккумулятора на основе слоистого оксида  $\text{LiNi}_{0.6}\text{Mn}_{0.2}\text{Co}_{0.2}\text{O}_2$  и графита

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

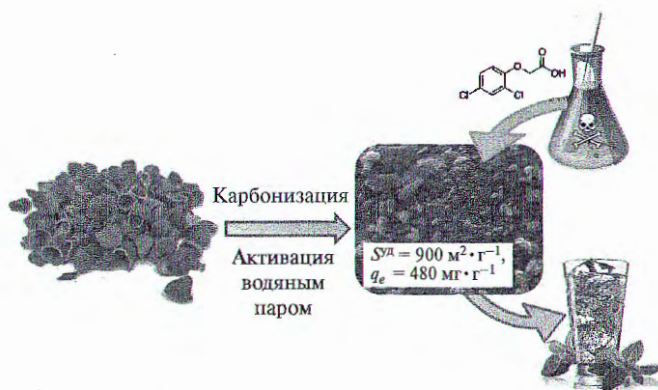


Реагенты и условия:  $(\text{MeO})_2\text{CO}$ ,  $\text{MeOC(O)OEt}$ , 1,3-диоксолан-2-он; N — число циклов заряда—разряда.

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

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

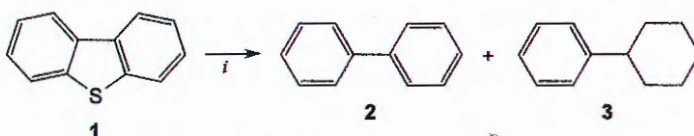
М. Д. Веденяпина, А. К. Ракишев,  
А. Ю. Курмышева, С. А. Кулайшин,  
Е. А. Райская, О. Б. Бельская



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

### Криогенное диспергирование молибденита как метод повышения активности массивных катализаторов на его основе

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



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

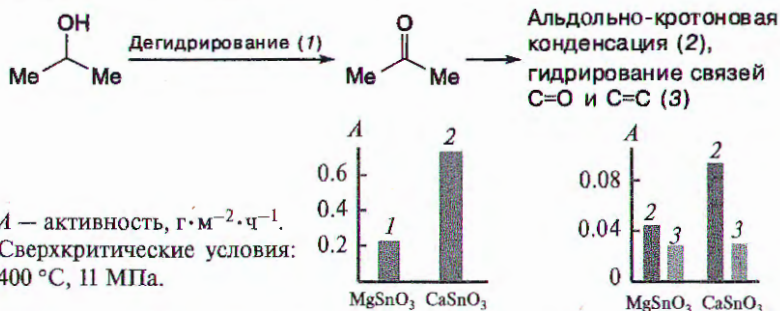
Изучена каталитическая активность дисульфида молибдена, подвергнутого криогенному диспергированию в He,  $\text{H}_2$ ,  $\text{N}_2$  и Ar, в реакции гидродесульфирования дибензотиофена (1) с образованием бифенила (2) и циклогексилбензола (3);  $[\text{S}]_{\text{res}}$  — остаточное содержание серы в продуктах реакции.

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

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

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

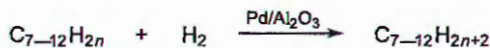
Т. В. Богдан, А. Р. Саварец,  
Н. В. Машенко, А. Е. Коклин,  
О. П. Ткаченко, В. И. Богдан



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

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

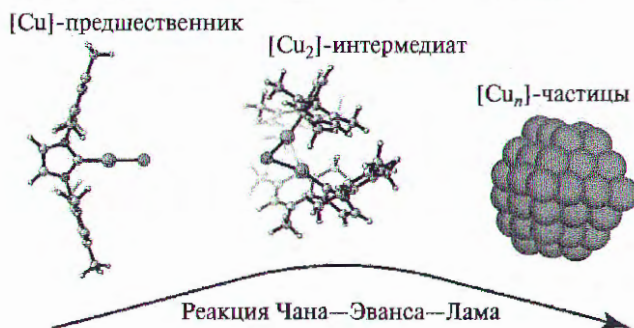
А. Н. Каленчук, Н. Н. Толкачев,  
И. И. Лишинер, О. В. Малова,  
Л. М. Кустов



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

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

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

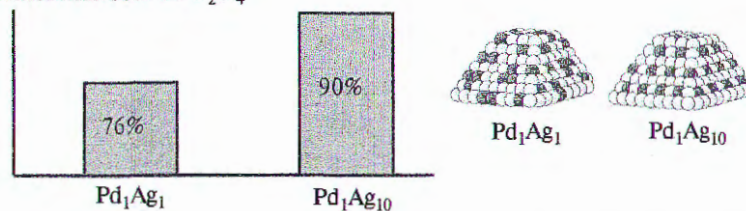


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1182

**Роль изолированных атомов палладия в катализаторах PdAg/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> для селективного гидрирования ацетилена**

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

Селективность по C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>



Иzv. AN. Ser. khim., 2024, 73, № 5, 1189

**Высокоселективное Pd-катализируемое гидроксикарбонилирование стирола**

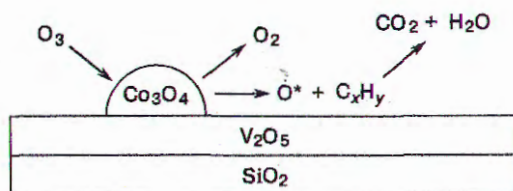
О. Л. Елисеев, Т. Н. Бондаренко,  
М. В. Цапкина, А. Л. Лапидус



Иzv. AN. Ser. khim., 2024, 73, № 5, 1197

**Промотированный кобальтом высокоэффективный V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/SiO<sub>2</sub>-катализатор окисления летучих органических соединений озонном**

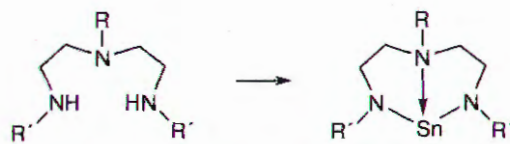
Д. А. Бокарев, С. А. Канаев,  
Г. О. Брагина, А. Е. Ваулина,  
Г. П. Баева, А. Ю. Стахеев



Иzv. AN. Ser. khim., 2024, 73, № 5, 1201

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

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

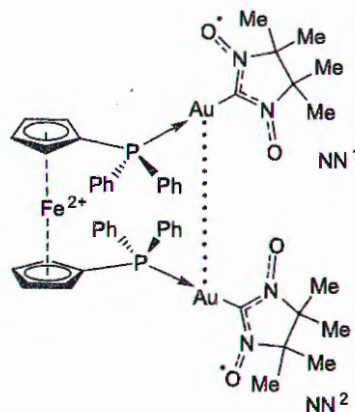


R = Et, Bn, Bu<sup>t</sup>; R' = Et, Bn, Ph

Иzv. AN. Ser. khim., 2024, 73, № 5, 1208

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

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



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

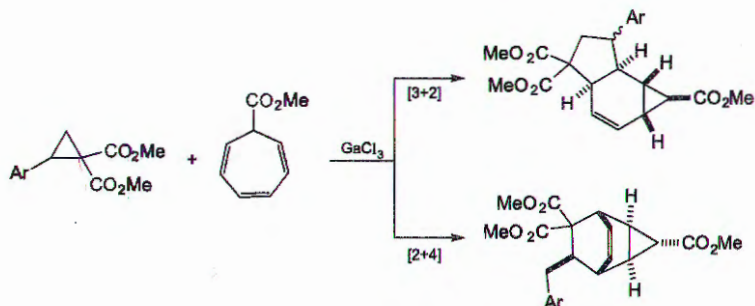
Au...Au: 3.372 Å, 6.0 ккал·моль<sup>-1</sup>;

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

Иzv. AN. Ser. khim., 2024, 73, № 5, 1216

**Пути превращения 2-арилциклопропан-1,1-дикарбоксилатов с монозамещенными циклогентатриенами под действием GaCl<sub>3</sub>**

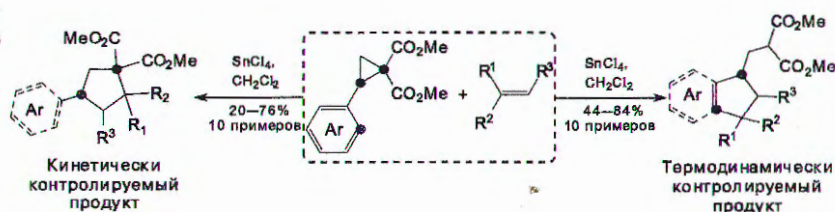
Д. Д. Борисов, А. А. Ершова,  
Д. Н. Платонов, Р. А. Новиков,  
Ю. В. Томилов



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

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

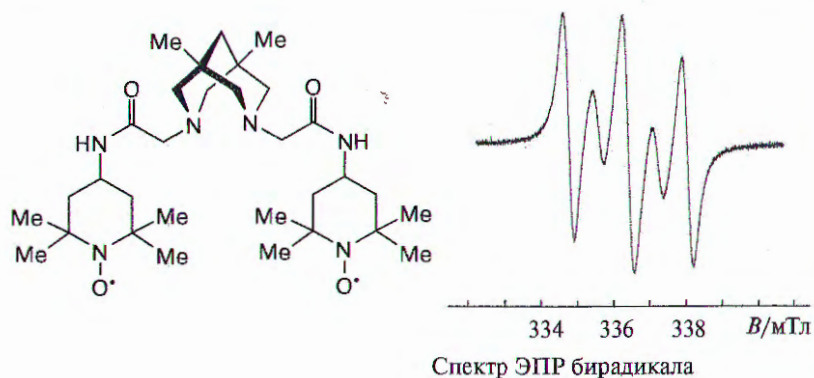
Ю. А. Волкова, М. А. Бойченко,  
В. В. Шорохов, С. С. Жохов,  
И. А. Андреев, Н. К. Ратманова,  
И. В. Трушков, О. А. Иванова



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

**Синтез спин-меченых биспидинов**

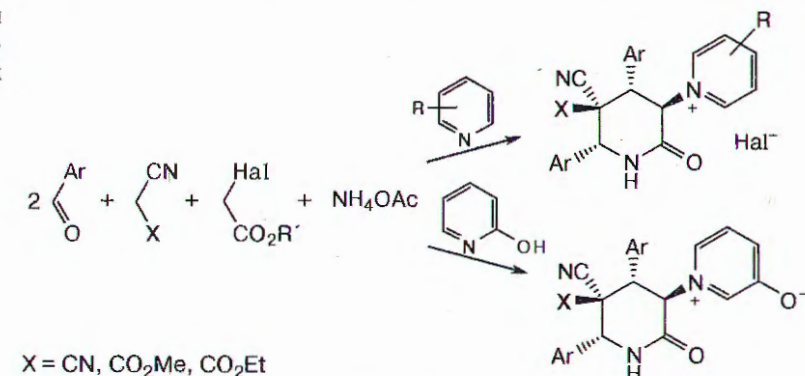
А. М. Закиров, А. В. Медведько,  
И. И. Трошин, Е. В. Третьяков,  
С. З. Вацадзе



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

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

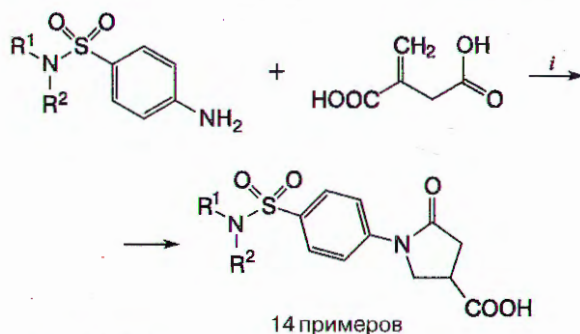
А. Д. Винокуров, Т. М. Илиясов,  
К. А. Карпенко, А. Б. Валеев,  
А. Н. Фахрутдинов, М. Н. Элинсон,  
А. Н. Верещагин



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

**Синтез 5-оксо-1-[4-(аминосульфил)фенил]-пипролидин-3-карбоновых кислот**

С. А. Серков, Н. В. Сигаи,  
Н. Н. Костикова, А. П. Тюрин,  
Н. Г. Колотыркина, Г. А. Газиева

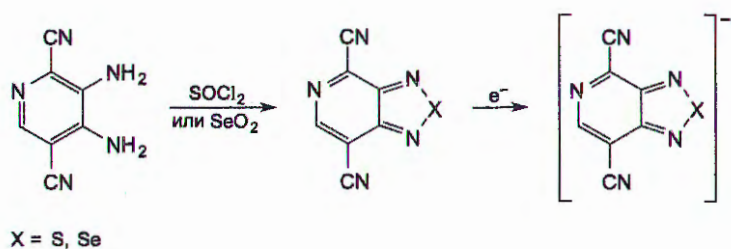


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1273

и. 140–165 °С, 3–6 ч.

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

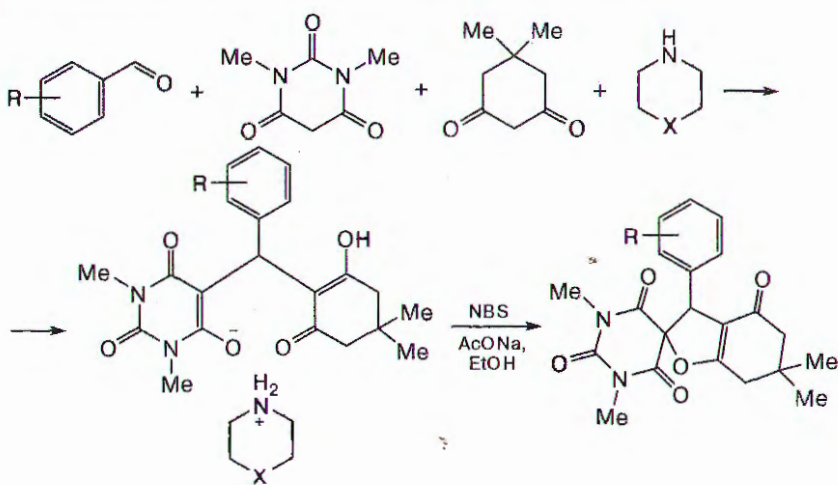
Т. П. Чимовж, Т. А. Кудряшев,  
И. В. Михальченко, О. А. Ракидин



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

**Мультикомпонентный синтез новых производных барбитуровой кислоты**

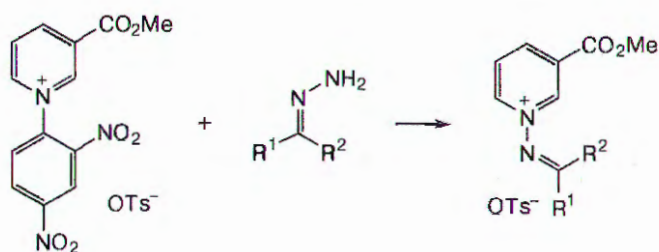
М. П. Элинсон, А. Н. Верещагин,  
Ю. Е. Рыжкова, К. А. Карпенко,  
Т. М. Илиясов, В. М. Калашникова,  
М. П. Егоров



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

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

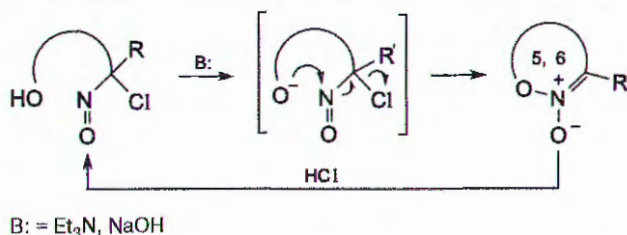
Е. А. Ильин, В. О. Смирнов,  
А. Д. Дильман



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

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

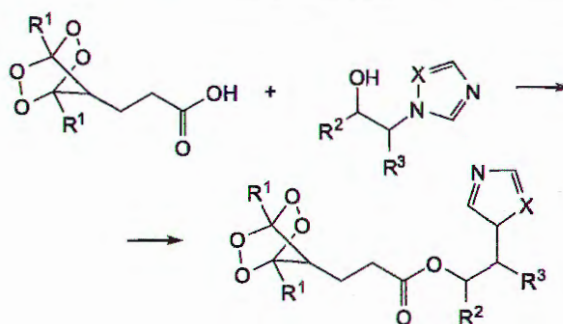
Р. С. Мальхин, А. Ю. Сухоруков



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

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

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



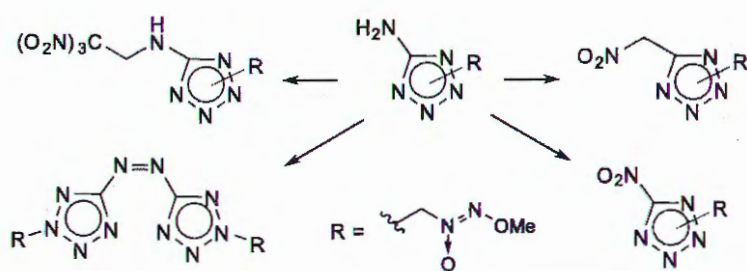
R<sup>1</sup> = Me, Et; R<sup>2</sup> = H, Cl, Bu<sup>1</sup>; R<sup>3</sup> = H, OPhCl; X = N, CH  
Выходы продуктов 31–57%.

Фунгицидная активность в отношении фитопатогенных грибов.

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

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

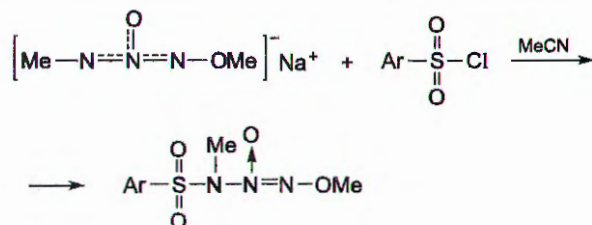
С. В. Никитин, Г. А. Смирнов



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

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

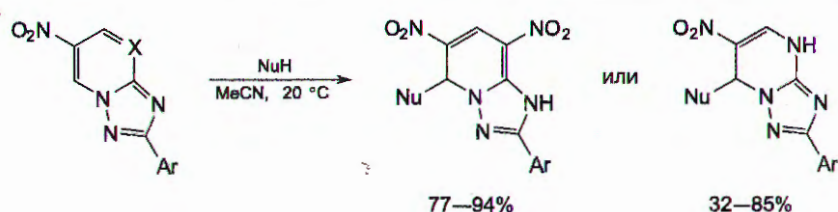
Г. В. Похвиснева, С. Д. Будина,  
Г. А. Смирнов



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

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

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

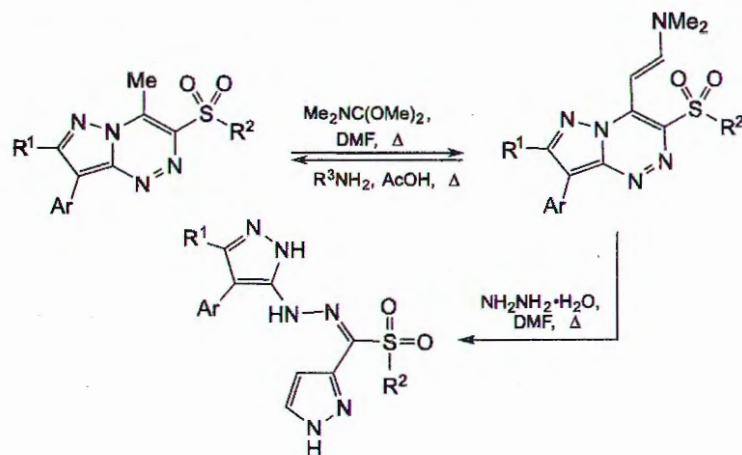


NuH: полифенолы, индолы, 1,3-дикарбонильные соединения

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

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

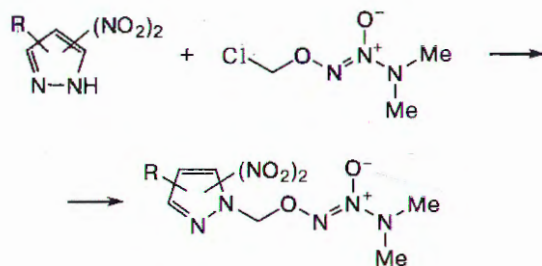
И. В. Леденева, П. А. Картавец,  
Н. В. Столповская, Х. С. Шихалиев



R<sup>1</sup> = H, Me, CH<sub>2</sub>OMe; R<sup>2</sup> = Me, 4-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; R<sup>3</sup> = Alk, Ar

**O-Динитропиразолилметилсодержащие diaзений-1,2-диолаты: синтез и свойства**

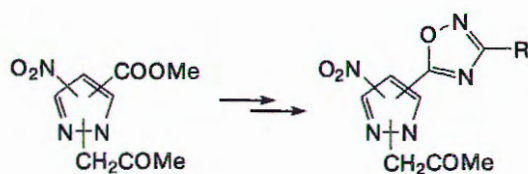
Г. А. Смирнов, И. А. Вацадзе,  
А. М. Герасимов, Т. К. Шкинева,  
К. Ю. Супоницкий, А. Н. Пивкина,  
И. Л. Далингер



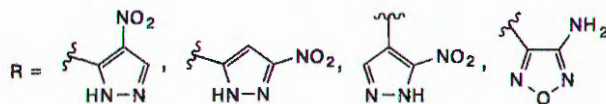
R = H, Me, NH<sub>2</sub>

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

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

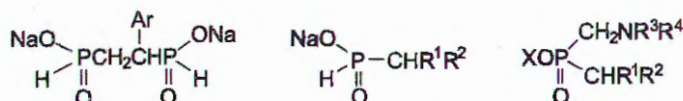


Т. Э. Хоранин, П. К. Гудина,  
К. Ю. Сулощский, И. Л. Далингер



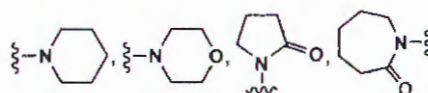
Иш. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1362

Синтез функционализированных фосфорных аналогов β-фенилаланина



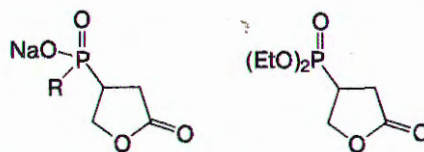
Ю. И. Бубнов, А. А. Прищенко,  
М. В. Ливанцов, О. П. Новикова,  
Л. И. Ливанцова, С. В. Баранин

Ar = Ph, 4-MeOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>; R<sup>1</sup> = H, COOX; X = H, Na;  
R<sup>2</sup> = CH<sub>2</sub>Ph, CH(Ph)CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Ph;  
NR<sup>3</sup>R<sup>4</sup> = NMe<sub>2</sub>, N(Me)Ac, N(COOEt)CH<sub>2</sub>COOMe,



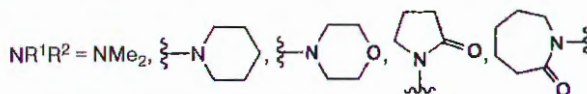
Иш. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1374

Синтез функционализированных фосфор-замещенных производных γ-бутиролактона



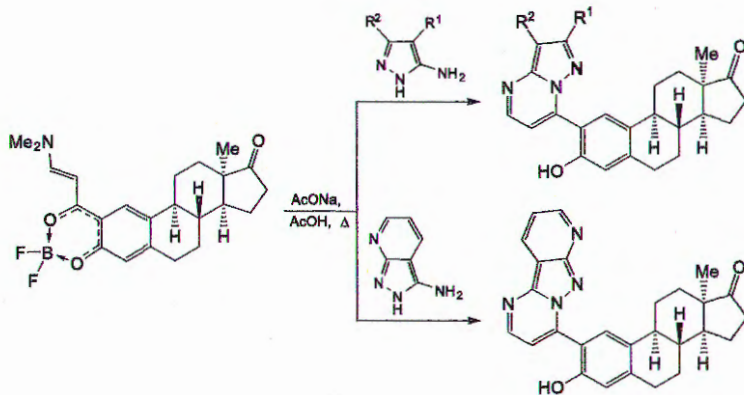
Ю. И. Бубнов, А. А. Прищенко,  
М. В. Ливанцов, О. П. Новикова,  
Л. И. Ливанцова, С. В. Баранин

R = H, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>C(O)ONa, CH<sub>2</sub>NR<sup>1</sup>R<sup>2</sup>;



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

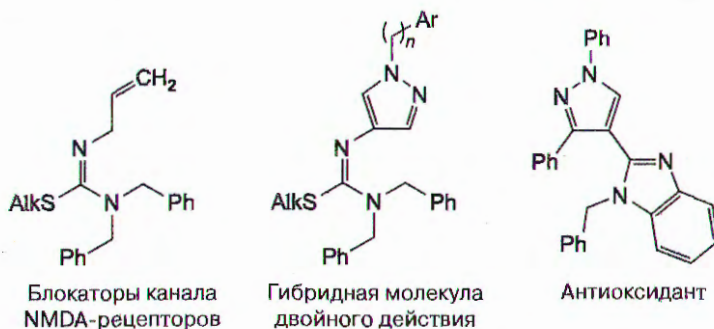
Синтез (13α)-эстронов, содержащих пирозоло[1,5-*a*]пиримидиновые фрагменты в боковой цепи кольца А



А. А. Суханова, М. А. Презент,  
А. И. Фахрутдинов, И. В. Заварзин

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

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



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

Блокаторы канала  
NMDA-рецепторов

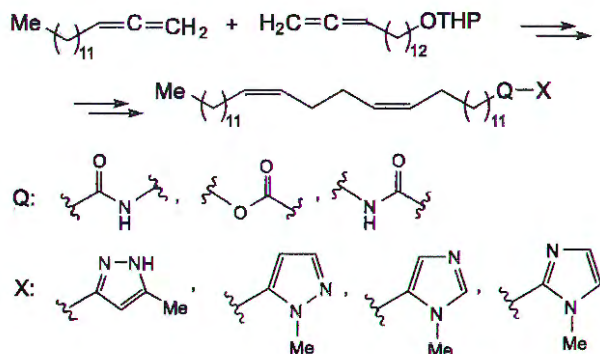
Гибридная молекула  
двойного действия

Антиоксидант

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

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

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

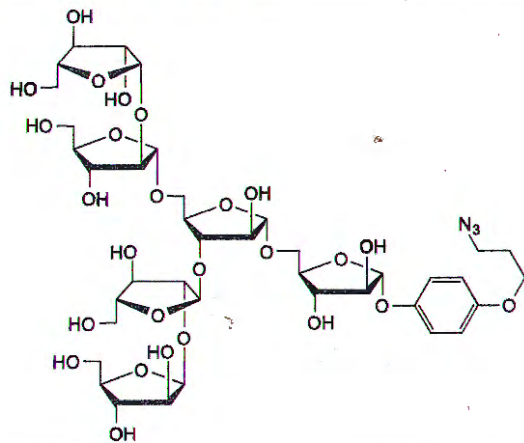


THP — 2-тетрагидропиранил

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

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

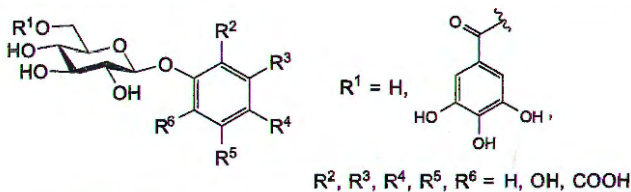
П. И. Абронина, Н. Н. Малышева,  
А. И. Зинин, Н. Г. Колотыркина,  
Л. О. Кононов



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

**Синтез β-глюкозидов, содержащих остатки галловой кислоты**

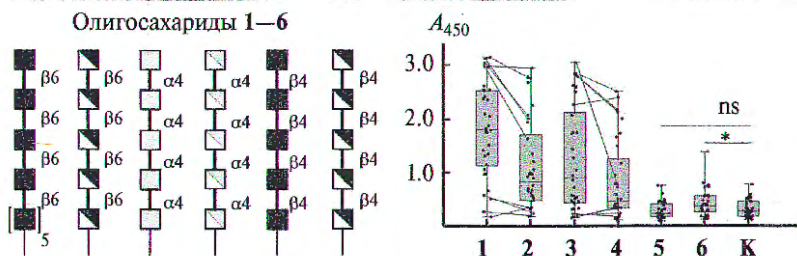
Д. В. Яшунский, А. М. Егоров,  
Н. Э. Нифантьев



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

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

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



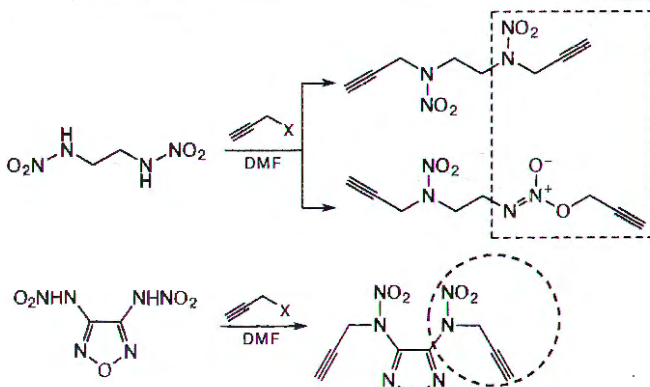
Результаты скрининга IgG-антител, специфичных олигосахаридам 1–6, в сыворотках крови здоровых доноров; ns — недостоверно.

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

**Краткие сообщения**

***N*-Пропаргилнитрамы: синтез и строение**

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

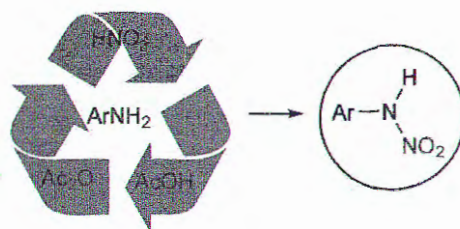


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1443

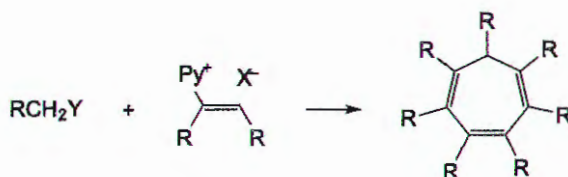


## Эффективный синтез арилнитраминов

Д. Л. Липилин, А. Б. Шереметев

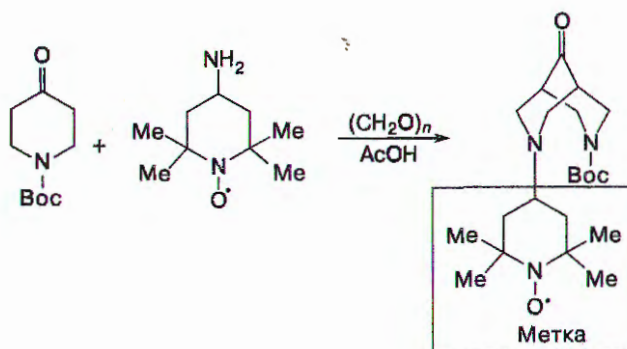


Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1450

Исследование реакций СН-кислот с генерируемым *in situ* *N*-[1,2-бис(метоксикарбонил)-винил]пиридинием в синтезе 1,2,3,4,5,6,7-гепта(метоксикарбонил)циклогептатриенаА. Ю. Белый, А. Д. Соколова,  
Р. Ф. Саликов, Д. Н. Платонов,  
Ю. В. ТомиловR = CO<sub>2</sub>Me; Y = Py<sup>+</sup>, <sup>+</sup>SMe<sub>2</sub>, Ts  
Y = PPh<sub>3</sub> — реакция не идет

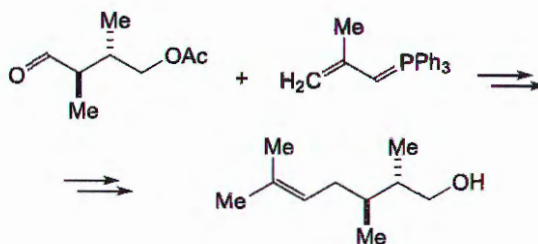
Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1455

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

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

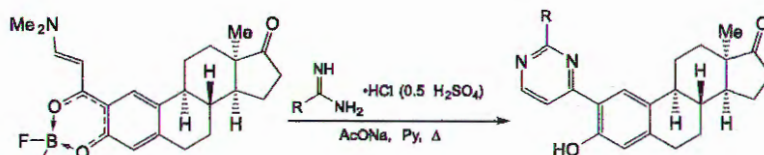
Изв. АН. Сер. хим., 2024, 73, № 5, 1460

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

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

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

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

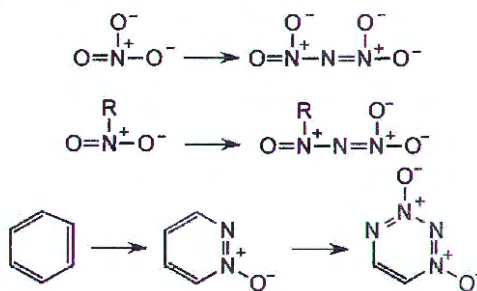
А. А. Суханова, М. А. Презент,  
А. Н. Фахрутдинов, И. В. ЗаварзинR = NH<sub>2</sub>, NHCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OMe, NHCH<sub>2</sub>Ph, HN-, -

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

## Информация

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

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



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

Памяти Леонида Исааковича Беленького

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