**Князева Мария Валерьевна**

ОТЧЕТ по научным исследованиям за 2 курс, 2 семестр обучения

|  |  |
| --- | --- |
| Направление подготовки | 04.06.01 Химические науки |
| Направленность (специальность) | 02.00.03 Органическая химия |
| Структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Лаборатория | ИОФХ им. А.Е.Арбузова, лаборатория ХК |
| Научный руководитель | Овсянников А.С., к.х.н, с.н.с. |
| Тема научно-квалификационной работы | Синтез и функциональные свойства новых дискретных комплексов (металлокластеров) на основе (тиа)каликс[n]аренов в конформации *конус*, включая их моно и дизамещённые производные с азотсодержащими группами на нижнем ободе |

1. Выполнение индивидуального плана научных исследований (за соответствующий период)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № п/п | Запланировано | Выполнено (% выполнения) |
| 1 | Синтез (тиа)каликс[4]аренов – строительных блоков для супрамолекулярных структур | Выполнено (100%) |
| 2 | Подбор условий и осуществление синтеза металлокластеров на основе нефункционализированных (тиа)каликс[4]аренов | Выполнено (100%) |
| 3 | Подбор условий и осуществление синтеза металлокластеров на основе функционализированных (тиа)каликс[4]аренов | Выполнено (70%) |
| 4 | Изучение кристаллической фазы на однородность при помощи метода дифракционной спектроскопии | Выполнено (80%) |
| 6 | Подготовка к отправке 3 публикаций по полученным ранее результатам (Diversity of new cobalt (II) and nickel (II) supramolecular complexes based on tetrasulfonyl thiacalix[4]arene and succinic acid (Acta Crystallographica Section C), Synthesis and crystal structure of new salen based thiacalix[4]arene ligand for binding of f-cations (Journal of inclusion phenomenon and and macrocyclic chemistry), New hexanuclear manganese complexes supported on mixted calix[4]arene/thiacalix[4]arene ligands (ChemComm)) | Выполнено (75%) |

1. Краткое описание полученных на текущий момент результатов

Синтезированы и изучены структуры в кристаллической фазе новых металлокластеров на основе (тиа)каликс[4]аренов с катионами марганца, и супрамолекулярных клеток на основе тетрасульфонового производного тиакаликс[4]арена в комбинации с карбоксилатными солигандами различной природы и катионами переходных металлов – никеля, кобальта, цинка, кристаллическая фаза полученных структур изучена на однородность. Получена серия производных (тиа)каликс[4]аренов, содержащих дополнительные координационные фрагменты на нижнем ободе, в том числе основания Шиффа, изучены их комплексообразующие свойства с рядом переходных металлов в растворе, также на основе дизамещенных производных (тиа)каликс[4]арено осуществлен синтез новых кластеров с лантаноидными металлами.

1. Публикации по теме научно-квалификационной работы (за все время обучения, включая тезисы докладов):

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № п/п | Библиографическое описание | Название издания (отметить издания из перечня ВАК) |
| 1 | Муравьев, А. А. Нитротиакаликсарены с алкильными группами на нижнем ободе: дизайн, синтез и агрегационное поведение на границе раздела фаз вода-воздух и в растворе / А.А. Муравьев, М.В. Князева, Р.А. Сафиуллин, А.В. Шокуров, С.Е. Соловьева, С.Л. Селектор, И.С. Антипин, А.И. Коновалов // Менделеевские сообщения. – 2017. — [Muravev, A.A. Nitrothiacalixarenes with Alkyl Groups on the Lower Rim: Design, Synthesis and Aggregation Behaviour at the Air-Water Interface and in Solution / A. A. Muravev, M. V. Knyazeva, R. A. Safiullin, A. V. Shokurov, S. E. Solovieva, S. L. Selektor, I. S. Antipin, and A. I. Konovalov // Mendeleev Commun. – 2017. – V. 27. – P. 413–415]. | Mendeleev Communications (журнал из перечня ВАК) |
| 2 | Knyazeva M.V. Synthesis of new calix[4]arene supported manganese clusters for single molecule magnets design / M.V. Knyazeva, A.S. Ovsyannikov, I.A Mikhaylova, S.E. Solovieva, P.V. Dorovatovskii, Y.V. Zubavichus, V.N. Khrustalev, I.S. Antipin // 1st Russian-Chinese Workshop on Organic and Supramolecular Chemistry (Kazan, Russia, August 27-29). – 2018. – P. 90. | 1st Russian-Chinese Workshop on Organic and Supramolecular Chemistry: book of abstracts (Kazan, Russia, August 27-29). |
| 3 | Knyazeva M.V. Design of new thiacalix[4]arene based supramolecular coordination cages / M.V. Knyazeva, A.S. Ovsyannikov, I.A Mikhaylova, S.E. Solovieva, P.V. Dorovatovskii, Y.V. Zubavichus, V.N. Khrustalev, I.S. Antipin // 1st Russian-Chinese Workshop on Organic and Supramolecular Chemistry (Kazan, Russia, August 27-29). – 2018. – P. 89. | 1st Russian-Chinese Workshop on Organic and Supramolecular Chemistry: book of abstracts (Kazan, Russia, August 27-29). |
| 4 | М.В. Князева Синтез и кристаллическая структура новой координационной клетки и 1D координационного полимера на основе взаимодействия тиакаликс[4]арена с катионами цинка (II) и кобальта (II) / М.В. Князева, А.С Овсянников, И.А. Михайлова, С.Е. Соловьева, И.С. Антипин // VIII Молодежная конференция ИОХ РАН: сборник тезисов докладов: 22-23 мая 2019 г., Москва. – 2019. – с. 117. | VIII Молодежная конференция ИОХ РАН: сборник тезисов докладов |
| 5 | Kniazeva M.V. Design of new calix[4]arene supported manganese cluster complexes / Kniazeva M.V., Ovsyannikov A.S., Mikhaylova I., Solovieva S.E., Dorovatovskii P.V., Zubavichus Y.V., Lazarenko V., Antipin I.S. // Book of abstracts: Marcovnikov Congress on Organic Chemistry (21-28 June 2019, Moscow-Kazan, Russia). – 2019. – P. 111. | Book of abstracts: Marcovnikov Congress on Organic Chemistry (21-28 June 2019, Moscow-Kazan, Russia) |
| 6 | Kniazeva M.V. Synthesis, structure and coordination ability of salen-type schiff bases based on calix[4]arene molecular platform / Kniazeva M.V., Ovsyannikov A.S., Mikhaylova I., Solovieva S.E., Dorovatovskii P.V., Lazarenko V., Antipin I.S. // Book of abstracts: Marcovnikov Congress on Organic Chemistry (21-28 June 2019, Moscow-Kazan, Russia). – 2019. – P. 112. | Book of abstracts: Marcovnikov Congress on Organic Chemistry (21-28 June 2019, Moscow-Kazan, Russia) |
| 7 | Kniazeva M.V. Design of new coordination cages suppoted on thiacalix[4]arene / Kniazeva M.V., Ovsyannikov A.S., Mikhaylova I., Solovieva S.E., Dorovatovskii P.V., Zubavichus Y.V., Lazarenko V., Antipin I.S. // Book of abstracts: Marcovnikov Congress on Organic Chemistry (21-28 June 2019, Moscow-Kazan, Russia). – 2019. – P. 183. | Book of abstracts: Marcovnikov Congress on Organic Chemistry (21-28 June 2019, Moscow-Kazan, Russia) |
| 8 | Ovsyannikov А.S. (Thia)calix[4]arenes as versatile molecular building blocks for design of coordination compounds of various dimensionalities in the crystalline phase / Ovsyannikov А.S., Kniazeva М.V., Ferlay S., Hosseini M.W., Solovieva S.Е., Antipin I.S. // ХХI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. Book 6: Abstracts. – 9-13 September 2019, Saint-Petersburg, Russia – 2019. – P. 248. | ХХI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. Book 6: Abstracts. – 9-13 September 2019, Saint-Petersburg, Russia |
| 9 | Kniazeva M.V Synthesis and structure of new hexa and octa nuclear manganese clusters based on calix[4]arene / Kniazeva M.V, Ovsyannikov A.S., Mikhaylova I., Solovieva S.E., Dorovatovskii P.V., Zubavichus Y.V., Lazarenko V., Antipin I.S. // ХХI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. Book 6: Abstracts. – 9-13 September 2019 Saint Petersburg, Russia – 2019. – P. 292. | ХХI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. Book 6: Abstracts. – 9-13 September 2019, Saint-Petersburg, Russia |
| 10 | Kniazeva M.V. Synthesis, structure and coordination ability of salen-type schiff bases based on calix[4]arene molecular platform / Kniazeva M.V., Ovsyannikov A.S., Mikhaylova I.A., Solovieva S.E., Dorovatovskii P.V., Lazarenko V.,Antipin I.S. // ХХI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. Book 6: Abstracts. – 9-13 September 2019 Saint Petersburg, Russia – 2019. – P. 293. | ХХI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. Book 6: Abstracts. – 9-13 September 2019, Saint-Petersburg, Russia |
| 11 | Kniazeva M.V. New coordination compounds based on (thia)calix[4]arenes bearing the salen-type coordinating sites /Kniazeva M.V., Ovsyannikov A.S., Samigullina A., Gubaydullin A.T., Solovieva S.E., Antipin I.S.// Школа-конференция для молодых ученых «Супрамолекулярные стратегии в химии, биологии и медицине: фундаментальные проблемы и перспективы». – 7-10 октября 2019 г., Казань. – 2019. – с. 51. | Школа-конференция для молодых ученых «Супрамолекулярные стратегии в химии,биологии и медицине: фундаментальные проблемы и перспективы (Казань, 2019): тезисы докладов |
| 12 | Kniazeva M.V. Design of new manganese based clusters supported on calix[4]arene /Kniazeva M.V., Ovsyannikov A.S., Dorovatovskii P.V., Dalgarno S.J., Solovieva S.E., Antipin I.S.// Школа-конференция для молодых ученых «Супрамолекулярные стратегии в химии, биологии и медицине: фундаментальные проблемы и перспективы». – 7-10 октября 2019 г., Казань. – 2019. – с. 95. | Школа-конференция для молодых ученых «Супрамолекулярные стратегии в химии,биологии и медицине: фундаментальные проблемы и перспективы (Казань, 2019): тезисы докладов |
| 13 | Kniazeva M.V. Design of new crystal supramolecular cages supported on mixted thiacalix[4]arene-calix[4]arene building blocks/ Kniazeva M.V., Ovsyannikov A.S., Islamov D.R., Samigullina A., Gubaydullin A.T., Solovieva S.E., Antipin I.S.// Школа-конференция для молодых ученых «Супрамолекулярные стратегии в химии, биологии и медицине: фундаментальные проблемы и перспективы». – 7-10 октября 2019 г., Казань. – 2019. – с. 96. | Школа-конференция для молодых ученых «Супрамолекулярные стратегии в химии,биологии и медицине: фундаментальные проблемы и перспективы (Казань, 2019): тезисы докладов |

1. Апробация результатов научно-квалификационной работы (за все время обучения):

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № п/п | Название конференции | Тип доклада |
| 1 | First Russian-Chinese Workshop on Organic and Supramolecular Chemistry | стендовый доклад |
| 2 | First Russian-Chinese Workshop on Organic and Supramolecular Chemistry | стендовый доклад |
| 3 | VIII Молодежная конференция ИОХ РАН 2019 | стендовый доклад |
| 4 | Markovnikov Congress of Organic Chemistry | стендовый доклад |
| 5 | Markovnikov Congress of Organic Chemistry | стендовый доклад |
| 6 | Markovnikov Congress of Organic Chemistry | стендовый доклад |
| 7 | Mendeleev Congress of General and Applied Chemistry | стендовый доклад |
| 8 | Mendeleev Congress of General and Applied Chemistry | стендовый доклад |
| 9 | Школа-конференция для молодых ученых «Супрамолекулярные стратегии в химии, биологии и медицине: фундаментальные проблемы и перспективы | стендовый доклад |

1. Иные достижения аспиранта:

Стипендиант программы «Остроградский» для научных визитов молодых российских ученых во Францию, № досье 946221K

Участие в гранте РФФИ № 19-03-00519 А «Макроциклические основания Шиффа саленового типа на основе каликс[4]аренов и их комплексы с рядом d- и f-катионов: синтез, структура, люминесцентные и магнитные свойства» (рук. Антипин И.С.)

Участие в гранте РНФ №17-73-20117 «Дизайн новых металл-органических кластеров и сеток на основе метациклофанов для фоторедокс катализа: получение водорода/углеводородов фотокаталитическим восстановлением H₂O/CO₂» (рук. Овсянников А.С.)

Подпись аспиранта

Подпись научного руководителя