

СПбГУ
ПРОТОКОЛ
заседания научной комиссии в области химических наук

24 марта 2023 г.

№ 11/7/4-02-10

Председательствующий – А.А. Маньшина, профессор

Секретарь – Е.А. Цыганкова, ведущий специалист

Присутствовали:

Младший научный сотрудник
Профессор
Старший научный сотрудник
Доцент
Профессор
Профессор
Доцент
Профессор
Научный сотрудник
Доцент
Доцент
Доцент
Профессор

А.В. Егорова
Е.В. Грачева
А.Р. Губаль
И.М. Зорин
Р.М. Исламова
Д.О. Кирсанов
О.Ю. Куралова
К.Н. Михельсон
А.Г. Пилип
И.А. Родионов
А.В. Сапегин
А.С. Тверьянович
П.М. Толстой

Повестка дня:

1. О рассмотрении заявки профессора А.А. Маньшиной на выполнение инициативного проекта без специально выделяемого финансирования;
 2. О включении доцента О.Ю. Бакулиной в Перечень потенциальных научных руководителей аспирантов;
 3. О замене научного руководителя аспиранту 1-го года обучения Ананьевой Анне Алексеевне;
 4. О замене научного руководителя аспиранту 4-го года обучения Бардакову Виктору Геннадьевичу.
-

1. О рассмотрении заявки профессора А.А. Маньшиной на выполнение инициативного проекта без специально выделяемого финансирования.
-

Е.В. Грачева

Научная комиссия рассмотрела материалы заявки профессора Маньшиной Алины Анвяровны на выполнение инициативного проекта без специально выделяемого финансирования «Разработка стратегии экспресс анализа биологически значимых аналитов (аминокислот, полипептидов) на основе процессов ГКР и машинного обучения» (ID Pure: 103568179).

Инициативный проект направлен на проведение поисковых исследований по выявлению характеристических сигналов биологически значимых аналитов в спектрах гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР) на наноструктурированных подложках

различного типа. Установление характеристических полос или их комбинаций в спектрах ГКР позволит с высокой точностью проводить детектирование и идентификацию анализов в биологических образцах разных типов вплоть до ультранизких концентраций 10^{-8} – 10^{-14} М. Кроме того ожидается решение задачи однозначной идентификации целевых анализов на фоне «мешающих» сигналов (так называемого матричного эффекта) от других компонентов биологических образцов, а также многокомпонентное детектирование в случаях присутствия набора анализов в исследуемых образцах.

В качестве ГКР активных подложек будут синтезироваться и исследоваться различные типы плазмонных наноструктур на основе наночастиц серебра, полученных с использованием лазерного осаждения и термического осаждения. Оптимизация условий синтеза каждого из выбранных подходов, а также их возможная комбинация позволит получить ГКР активные структуры, обладающие высоким коэффициентом усиления, высокой однородностью и повторяемостью их физико-химических и оптических свойств по поверхности.

Данные исследования будут проводиться при сотрудничестве двух групп – группы Лазерного синтеза Института химии СПбГУ (руководитель профессор Маньшина А.А.) и группы Гибридной металлодиэлектрической нанофотоники Университета ИТМО (руководитель с.н.с. Зувев Д.А.)

Обе взаимодействующие группы ведут разработки мирового уровня, имеют серьезный опыт в области ГКР, синтеза уникальных наноструктурированных объектов с заданными функциональными свойствами. Объединение усилий двух групп позволит получить новые результаты, формирующие конкурентоспособный задел для дальнейших исследований и привлечения внешнего финансирования. По результатам выполнения инициативного проекта ожидаются публикации уровня Q1 в журналах Scopus/WOS.

Исследования проводятся при участии Сбербанка в части использования их мощностей для решения задач машинного обучения и высокоскоростного и высокоточного детектирования биологически значимых анализов.

Результаты, которые будут получены в результате выполнения проекта будут обладать высоким потенциалом публикуемости в силу объединения целого ряда современных подходов (аналитика на основе ГКР, машинное обучение, дизайн ГКР подложек). По результатам выполнения проекта ожидаются 1-2 публикации в журналах Q1 цитируемых в WOS, Scopus.

ПОСТАНОВИЛИ: по итогам голосования (за – 13 (А.А. Маньшина в голосовании не участвовала), против – нет, воздержались – нет): 1) рекомендовать к выполнению инициативный проект без специально выделяемого финансирования «Разработка стратегии экспресс анализа биологически значимых анализов (аминокислот, полипептидов) на основе процессов ГКР и машинного обучения» (ID Pure: 103568179); 2) рекомендовать выполнение инициативного проекта в ресурсных центрах Научного парка СПбГУ: Междисциплинарный ресурсный центр по направлению «Нанотехнологии» и РЦ «Оптические и лазерные методы исследования вещества».

2. О включении доцента О.Ю. Бакулиной в Перечень потенциальных научных руководителей аспирантов.

А.А. Маньшина

Научная комиссия рассмотрела обращение (РК № 43/6/11-02-1 от 03.03.2023) коллектива Кафедры медицинской химии по вопросу включения доцента Бакулиной Ольги Юрьевны в Перечень потенциальных научных руководителей аспирантов.

Бакулина О.Ю. окончила СПбГУ в 2014 году, получив диплом специалиста по направлению «химия» (с отличием). В 2016 защитила кандидатскую диссертацию в диссультете ВАК при Институте Химии СПбГУ. В 2017-2020 работала в Институте Химии СПбГУ в должностях ассистента и старшего преподавателя, с 2020 и по настоящее время занимает должность доцента (до 2022 - кафедры химии природных соединений, затем медицинской химии). Под руководством Бакулиной О.Ю. были успешно выполнены восемь ВКР бакалавров и магистров, четыре из них отмечены ГЭК как лучшие работы.

Основные научные интересы Бакулиной О.Ю.:

- Органический синтез
- Гетероциклические соединения, синтез лактамов
- Многокомпонентная химия (реакции Кастаньоли-Кушмана, Уги, Штаудингера)
- Медицинская химия (дизайн и синтез ингибиторов карбоангидразы человека, лигандов цереблона, ингибиторов тиоредоксинредуктазы).

В настоящее время под руководством Бакулиной О.Ю. выполняются пять выпускных квалификационных работ.

Публикационная активность Бакулиной О.Ю.:

1. Индекс Хирша на 27.02.2023 (идентификатор), индекс цитирования (число учтенных статей):

(а) Web of Science: не доступен (б) Scopus: идентификатор: 55765873500

индекс цитирования: 12

число учтенных статей: 68

(в) Google Scholar:

идентификатор: -

индекс цитирования: 14

число учтенных статей: 73

Список публикаций за последние 3 года:

1. Krasavin, M.; Peshkov, A. A.; Makhmet, A.; Bakulina, O.; Kanov, E.; Gainetdinov, R.; Peshkov, V. A.; Dar'in, D., A General Approach to Spirocyclic Piperidines via Castagnoli-Cushman Chemistry. *Synthesis* 2022, 54, (11), 2604-2615, 10.1055/s-0040-1719878.

2. Lukyanov, D. A.; Kalnin, A. Y.; Rubicheva, L. G.; Potapenkov, V. V.; Bakulina, O. Y.; Levin, O. V., Application of a TEMPO-Polypyrrole Polymer for NO_x-Mediated Oxygen Electroreduction. *Catalysts* 2022, 12, (11), 10.3390/catal12111466.

3. Paramonova, P.; Bakulina, O.; Nabiyeu, A.; Dar'in, D.; Krasavin, M., Castagnoli-Cushman Reaction of 3-Aryl Glutaric Acids: A Convenient, Diastereoselective Reaction for 6-Oxo-2,4-diarylpiperidine-3-carboxylic Acid Scaffold. *ChemistrySelect* 2022, 7, (3), 10.1002/slct.202104011.

4. Bakulina, O.; Bannykh, A.; Levashova, E.; Krasavin, M., Conjugates of Iron-Transporting N-Hydroxylactams with Ciprofloxacin. *Molecules* 2022, 27, (12), 10.3390/molecules27123910.

5. Ananeva, A.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Kantin, G.; Krasavin, M., Dicarboxylic Acid Monoesters in beta- and delta-Lactam Synthesis. *Molecules* 2022, 27, (8), 10.3390/molecules27082469.

6. Lukin, A.; Chudinov, M.; Vedekhina, T.; Rogacheva, E.; Kraeva, L.; Bakulina, O.; Krasavin, M., Exploration of Spirocyclic Derivatives of Ciprofloxacin as Antibacterial Agents. *Molecules* 2022, 27, (15), 10.3390/molecules27154864.

7. Guranova, N.; Yakovleva, L.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Krasavin, M., Extending the Scope of the New Variant of the Castagnoli-Cushman Cyclocondensation onto o-Methyl Benzo-

- ic Acids Bearing Various Electron-Withdrawing Groups in the alpha-Position. *Molecules* 2022, 27, (21), 10.3390/molecules27217211.
8. Guranova, N.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Kantin, G.; Krasavin, M., Homophthalic Esters: A New Type of Reagents for the Castagnoli-Cushman Reaction. *European Journal of Organic Chemistry* 2022, 2022, (9), 10.1002/ejoc.202101281.
 9. Paramonova, P.; Lebedev, R.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Krasavin, M., In situ generation of imines by the Staudinger/aza-Wittig tandem reaction combined with thermally induced Wolff rearrangement for one-pot three-component beta-lactam synthesis. *Org Biomol Chem* 2022, 20, (48), 9679-9683, 10.1039/d2ob01852g.
 10. Bannykh, A.; Levashova, E.; Bakulina, O.; Krasavin, M., New reagent space and new scope for the Castagnoli-Cushman reaction of oximes and 3-arylglutaconic anhydrides. *Org Biomol Chem* 2022, 20, (44), 8643-8648, 10.1039/d2ob01675c.
 11. Lebedev, R.; Dar'in, D.; Kantin, G.; Bakulina, O.; Krasavin, M., One-Pot Sequence of Staudinger/aza-Wittig/Castagnoli-Cushman Reactions Provides Facile Access to Novel Natural-like Polycyclic Ring Systems. *Molecules* 2022, 27, (23), 10.3390/molecules27238130.
 12. Firsov, A.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Sokolov, V. V.; Krasavin, M., Synthesis of gamma-Sultam-Annulated delta-Lactams via the Castagnoli-Cushman Reaction of Sultam-Based Dicarboxylic Acids. *The Journal of organic chemistry* 2022, 87, (2), 1537-1540, 10.1021/acs.joc.1c02456.
 13. Moshnenko, N.; Kazantsev, A.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Krasavin, M., The Use of Aryl-Substituted Homophthalic Anhydrides in the Castagnoli-Cushman Reaction Provides Access to Novel Tetrahydroisoquinolone Carboxylic Acid Bearing an All-Carbon Quaternary Stereogenic Center. *Molecules* 2022, 27, (23), 10.3390/molecules27238462.
 14. Kazantsev, A.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Kantin, G.; Bunev, A.; Krasavin, M., Unexpected Ring Contraction of Homophthalic Anhydrides under Diazo Transfer Conditions. *Organic letters* 2022, 24, (26), 4762-4765, 10.1021/acs.orglett.2c01730.
 15. Zhukovsky, D.; Dar'in, D.; Bakulina, O.; Krasavin, M., Preparation and Synthetic Applications of Five-to-Seven-Membered Cyclic alpha-Diazo Monocarbonyl Compounds. *Molecules* 2022, 27, (6), 10.3390/molecules27062030.
 16. Levashova, E.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Krasavin, M., Catalyst-Free Synthesis of Diastereomerically Pure 3-Cyanoazetidin-2-ones via Thermally Promoted Tandem Wolff Rearrangement–Staudinger [2+2] Cycloaddition. *ChemistrySelect* 2021, 6, (47), 13582-13588, 10.1002/slct.202103446.
 17. Chupakhin, E.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Krasavin, M., Facile entry into the 1H-pyrrolo[3,4-b]indolizine-1,3(2H)-dione scaffold via intramolecular Rh(II) carbene trapping. *Tetrahedron Letters* 2021, 85, 10.1016/j.tetlet.2021.153467.
 18. Bakulina, O.; Inyutina, A.; Dar'in, D.; Krasavin, M., Multicomponent Reactions Involving Diazo Reagents: A 5-Year Update. *Molecules* 2021, 26, (21), 10.3390/molecules26216563.
 19. Levashova, E.; Firsov, A.; Bakulina, O.; Peshkov, A.; Kanov, E.; Gainetdinov, R. R.; Krasavin, M., Rare cis-configured 2,4-disubstituted 1-alkylpiperidines: synthesized and tested against trace-amine-associated receptor 1 (TAAR1). *Mendeleev Communications* 2021, 31, (4), 488-489, 10.1016/j.mencom.2021.07.016.
 20. Guranova, N.; Golubev, P.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Kantin, G.; Krasavin, M., Unexpected formal [4 + 2]-cycloaddition of chalcone imines and homophthalic anhydrides: preparation of dihydropyridin-2(1H)-ones. *Org Biomol Chem* 2021, 19, (17), 3829-3833, 10.1039/d1ob00534k.
 21. Peshkov, A. A.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Kantin, G.; Bannykh, A.; Peshkov, V. A.; Krasavin, M., Three-Component Castagnoli-Cushman Reaction of 3-Arylglutaconic Acid Anhydrides, Carbonyl Compounds, and Ammonium Acetate: a Quick and Flexible Way to Assemble Polysubstituted NH- δ -lactams. *European Journal of Organic Chemistry* 2021, 2021, (11), 1726-1731, 10.1002/ejoc.202001617.

22. Bakulina, O.; Klochkova, A.; Bubyrev, A.; Dar'in, D.; Krasavin, M.; Sokolov, V., Straightforward Route to γ -Sultams via Novel Tandem SN/Michael Addition. *Synthesis* 2020, 53, (10), 1795-1804, 10.1055/a-1343-9451.
23. Rashevskii, A.; Bakulina, O.; Novikov, M. S.; Dar'in, D.; Krasavin, M., When periphery matters: Enhanced reactivity of 8-oxa-1,4-dithiaspiro[4.5]decane-7,9-dione and 9-oxa-1,5-dithiaspiro[5.5]undecane-8,10-dione in the Castagnoli-Cushman reaction with imines. *Tetrahedron Letters* 2020, 61, (52), 10.1016/j.tetlet.2020.152658.
24. Dar'in, D.; Kantin, G.; Bakulina, O.; Inyutina, A.; Chupakhin, E.; Krasavin, M., Spirocyclizations Involving Oxonium Ylides Derived from Cyclic α -Diazocarbonyl Compounds: An Entry into 6-Oxa-2-azaspiro[4.5]decane Scaffold. *The Journal of organic chemistry* 2020, 85, (23), 15586-15599, 10.1021/acs.joc.0c02356.
25. Krasavin, M.; Synofzik, J.; Bakulina, O.; Balabas, O.; Dar'in, D., Catalyst-Free Synthesis of Diastereomerically Pure 3-Sulfonyl-azetidino-2-ones via Microwave-Assisted Tandem Wolff Rearrangement–Staudinger Cycloaddition. *Synthesis* 2020, 10.1055/s-0040-1707193.
26. Safrygin, A.; Dar'in, D.; Bakulina, O.; Krasavin, M., Synthesis of spirocyclic tetrahydroisoquinolines (spiroTHIQs) via the Castagnoli-Cushman reaction. *Tetrahedron Letters* 2020, 61, (42), 10.1016/j.tetlet.2020.152408.
27. Chuprun, S.; Dar'in, D.; Rogacheva, E.; Kraeva, L.; Levin, O.; Manicheva, O.; Dogonadze, M.; Vinogradova, T.; Bakulina, O.; Krasavin, M., Mutually Isomeric 2- and 4-(3-nitro-1,2,4-triazol-1-yl)pyrimidines Inspired by an Antimycobacterial Screening Hit: Synthesis and Biological Activity against the ESKAPE Panel of Pathogens. *Antibiotics (Basel)* 2020, 9, (10), 10.3390/antibiotics9100666.
28. J, V. M.; Ehnbohm, A.; Garedeew, M.; Vincent-Ruz, P.; Schloemer, T. H.; Hodgson, G. K.; Oakley, M. S.; Sasaki, K.; Chander, S.; Legare, M. A.; Callmann, C. E.; Bismillah, A. N.; van Osch, D.; Sanchez, V.; Boase, N. R. B.; Mambwe, D.; Coley, C. W.; Deng, Y.; Betz, K. N.; Sanjose-Orduna, J.; Natoli, S.; Zhang, L.; Bakulina, O.; Fereyduni, E.; Hilario-Martinez, J. C.; Busta, L.; Hunter, A.; Park, Y.; Zadeh, F. H., The Future of Scientific Leadership is Interdisciplinary: The 2019 CAS Future Leaders Share Their Vision. *iScience* 2020, 23, (9), 101442, 10.1016/j.isci.2020.101442.
29. Krasavin, M.; Synofzik, J.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Kantin, G., Dialkyl Diazomalones in Transition-Metal-Free, Thermally Promoted, Diastereoselective Wolff β -Lactam Synthesis. *Synlett* 2020, 31, (13), 1273-1276, 10.1055/s-0040-1707811.
30. Krasavin, M.; Dar'in, D.; Kantin, G.; Bakulina, O., Facile One-Pot Access to α -Diazo- β -ketosulfones from Sulfonyl Chlorides and α -Haloketones. *Synthesis* 2020, 52, (15), 2259-2266, 10.1055/s-0040-1707525.
31. Krasavin, M.; Safrygin, A.; Bakulina, O.; Dar'in, D., Three-Component Reaction of Homophthalic Anhydride with Carbonyl Compounds and Ammonium Acetate: New Developments. *Synthesis* 2020, 52, (15), 2190-2195, 10.1055/s-0040-1708017.
32. Firsov, A.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Guranova, N.; Krasavin, M., Further Insight into the Castagnoli-Cushman-type Synthesis of 1,4,6-Trisubstituted 1,6-Dihydropyridin-2-(3H)-ones from 3-Arylglytaconic Acid Anhydrides. *The Journal of organic chemistry* 2020, 85,(10), 6822-6829, 10.1021/acs.joc.0c00836.
33. Zhmurov, P. A.; Dar'in, D. V.; Bakulina, O. Y.; Krasavin, M., One-pot preparation of methyl 2-diazo-3-oxopropionates comprising an aqueous 'sulfonyl-azide-free' (SAFE) diazo transfer step. *Mendeleev Communications* 2020, 30, (3), 311-312, 10.1016/j.mencom.2020.05.016.
34. Levashova, E.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Bubyrev, A.; Chuprun, S.; Krasavin, M., From Rare Reagents to Rare Products: Regiospecific Silver-Catalyzed [3+2] Cycloaddition of Aryl-, Alkyl- and Aminosulfonyl Diazomethanes with Arenediazonium Tosylates. *European Journal of Organic Chemistry* 2020, 2020, (27), 4239-4242, 10.1002/ejoc.202000619.

35. Bakhholdina, A.; Lukin, A.; Bakulina, O.; Guranova, N.; Krasavin, M., Dual use of propargylamine building blocks in the construction of polyheterocyclic scaffolds. *Tetrahedron Letters* 2020, 61, (24), 10.1016/j.tetlet.2020.151970.

36. Karchuganova, E.; Bakulina, O.; Dar'in, D.; Krasavin, M., Two Annulated Azaheterocyclic Cores Readily Available from a Single Tetrahydroisoquinolonic Castagnoli-Cushman Precursor. *Molecules* 2020, 25, (9), 10.3390/molecules25092049.

Под руководством Бакулиной О.Ю. аспирант кафедры медицинской химии будет выполнять исследование на тему: «Новые каталитические подходы к многокомпонентным реакциям иминов» по научной специальности 1.4.3 «Органическая химия».

ПОСТАНОВИЛИ: по итогам голосования (за – 14, против – нет, воздержались – нет), рекомендовать включить доцента О.Ю. Бакулину в Перечень потенциальных научных руководителей аспирантов по научной специальности 1.4.3. «Органическая химия».

3. О замене научного руководителя аспиранту 1-го года обучения Ананьевой Анне Алексеевне и о внесении изменений в индивидуальный план аспиранта.

А.А. Маньшина

Научная комиссия рассмотрела заявление (РК № 05/1/13-12-93 от 24.03.2023) аспиранта 1-го года обучения Ананьевой Анны Алексеевны о замене научного руководителя, в связи со смертью действующего научного руководителя, профессора Красавина Михаила Юрьевича. В качестве нового научного руководителя предложена кандидатура доцента Бакулиной Ольги Юрьевны, Кафедра медицинской химии.

Научная комиссия рассмотрела предоставленный индивидуальный план аспиранта Ананьевой Анны Алексеевны, с внесенными изменениями, согласованными предлагаемым научным руководителем аспиранта – доцентом Бакулиной Ольгой Юрьевной. Рассмотрено содержание индивидуального плана аспиранта А.А. Ананьевой. Содержание индивидуального плана и внесенные изменения соответствуют Порядку подготовки индивидуального плана аспиранта, утвержденному Приказом от 23.08.2022 № 8908/1.

ПОСТАНОВИЛИ: по итогам голосования (за – 14, против – нет, воздержались – нет), рекомендовать: 1) назначить доцента О.Ю. Бакулину научным руководителем аспиранта 1-го года обучения А.А. Ананьевой; 2) рекомендовать к утверждению индивидуальный план аспиранта А.А. Ананьевой в новой редакции.

4. О замене научного руководителя аспиранту 4-го года обучения Бардакову Виктору Геннадьевичу.

А.А. Маньшина, П.М. Толстой

Научная комиссия рассмотрела обращение коллектива Кафедры физической органической химии (РК № 43/6/8-02-2 от 01.03.2023) о необходимости замены научного руководителя аспиранту 4-го года обучения Бардакову Виктору Геннадьевичу, в связи с увольнением действующего научного руководителя - доцента Антонова Александра Сергеевича. В качестве нового научного руководителя предложена кандидатура профессора Толстого Петра Михайловича.

ПОСТАНОВИЛИ: по итогам голосования (за – 13 (П.М. Толстой в голосовании не участвовал), против – нет, воздержались – нет), рекомендовать назначить профессора

П.М. Толстого новым научным руководителем аспиранта 4-го года обучения Бардакова Виктора Геннадьевича.

Председатель научной
комиссии



А.А. Маньшина

Секретарь научной
комиссии



Е.А. Цыганкова