

**ОТЧЕТ ЗА 2020 год**

**ДИРЕКТОРА ИРКУТСКОГО ИНСТИТУТ  
ХИМИИ им. А.Е. ФАВОРСКОГО**

**Иванова Андрея Викторовича**

# Статистическая информация. Кадры



Численность (на конец 2020 г), человек	277
Из них научных сотрудников, человек (ставок)	164 (140,5)
Численность сотрудников с ученой степенью	146
В том числе докторов наук	31
В том числе кандидатов наук	115
Количество молодых (до 39 лет включительно) научных сотрудников	72
Доля молодых (до 39 лет включительно) научных сотрудников от общего числа научных сотрудников, %	45
Численность аспирантов	17
Средний возраст с учетом всех сотрудников и аспирантов, лет	47,2

# Статистическая информация. Публикации



Монографии	2
Публикации, индексируемые WoS	179
В т.ч. обзоры	15
Статьи прочие	11
Патенты	5
Тезисы докладов	74
Средний импакт-фактор на 1 статью (только с учетом импакт-факторов WoS)	2,109
Количество статей WoS и Scopus на 1 научную ставку	1,39
Количество защит диссертаций	5
в том числе кандидатских диссертаций	5
в том числе докторских диссертаций	0
Суммарный ИФ:	400,693
Суммарный КБПР:	1058,979 (план 589,6)
КБПР на 1 научную ставку	7,906

Квартиль	Кол-во статей
Q1	23
Q2	71
Q3	39
Q4	33
Q	13

Кол-во статей в иностранных журналах	129 (68%)
Кол-во статей в российских журналах	61 (32%)

# Статистическая информация. Финансы

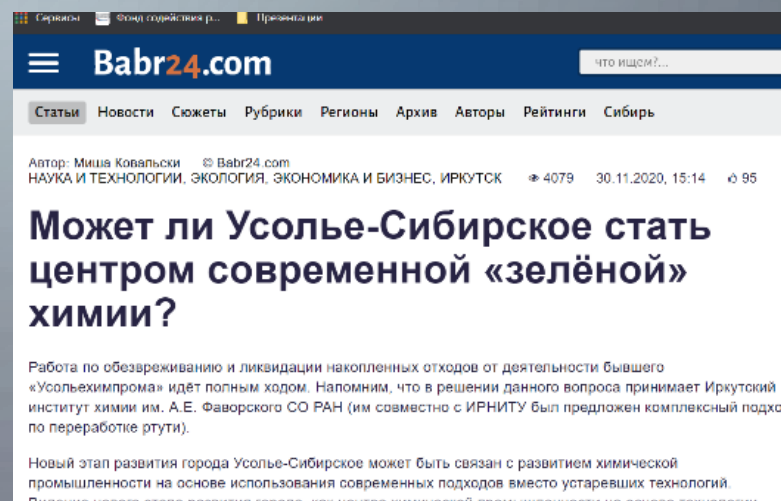
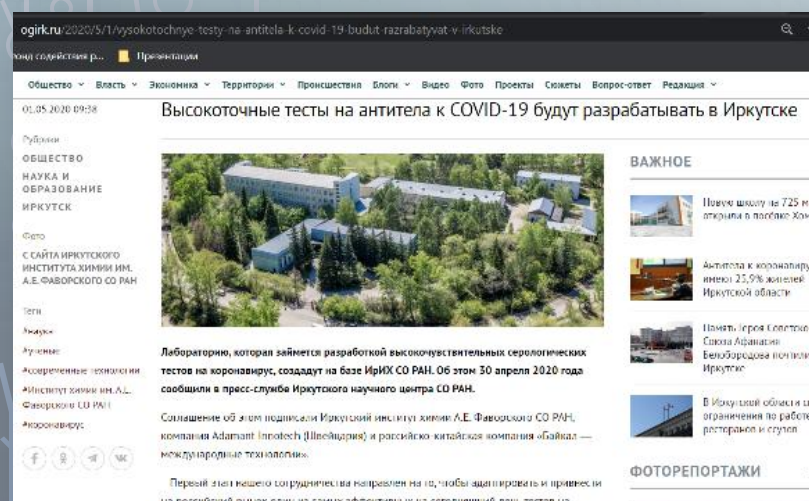
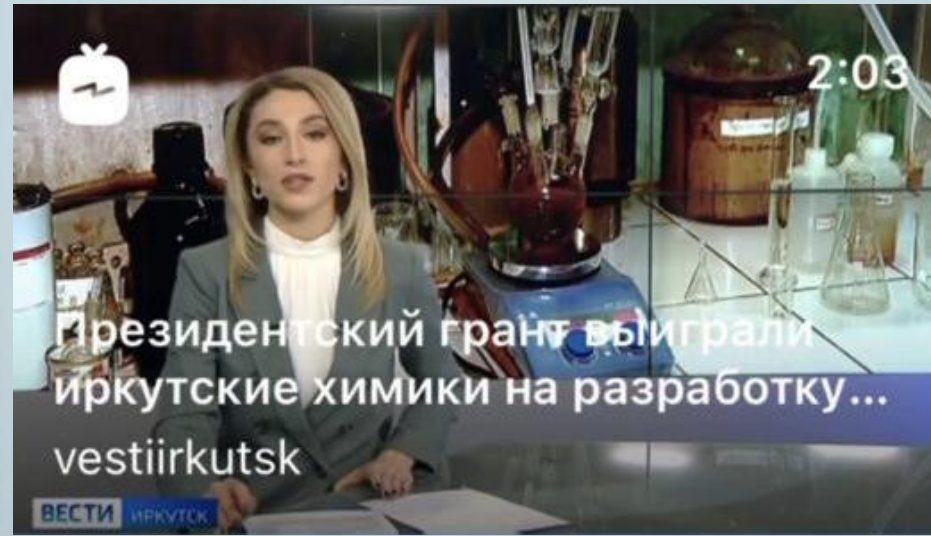


<b>Субсидия на ГЗ всего</b>	<b>235 928 027,62</b>
В том числе доп. финансирование на оплату труда научных сотрудников	10 178 100,00
<b>Внебюджетные средства всего</b>	<b>66 755 195,00</b>
в том числе:	
Доходы от аренды	1 210 216,00
Хоздоговоры	15 683 256,80
ДИСЭД	6 961 250,00
Гранты РФФ	21 600 000,00
Гранты РФФИ	18 300 000,00
Прочее	3 000 472,20
<b>Итого поступления 2020 г.</b>	<b>302 683 222,62</b>

# СМИ и SMM



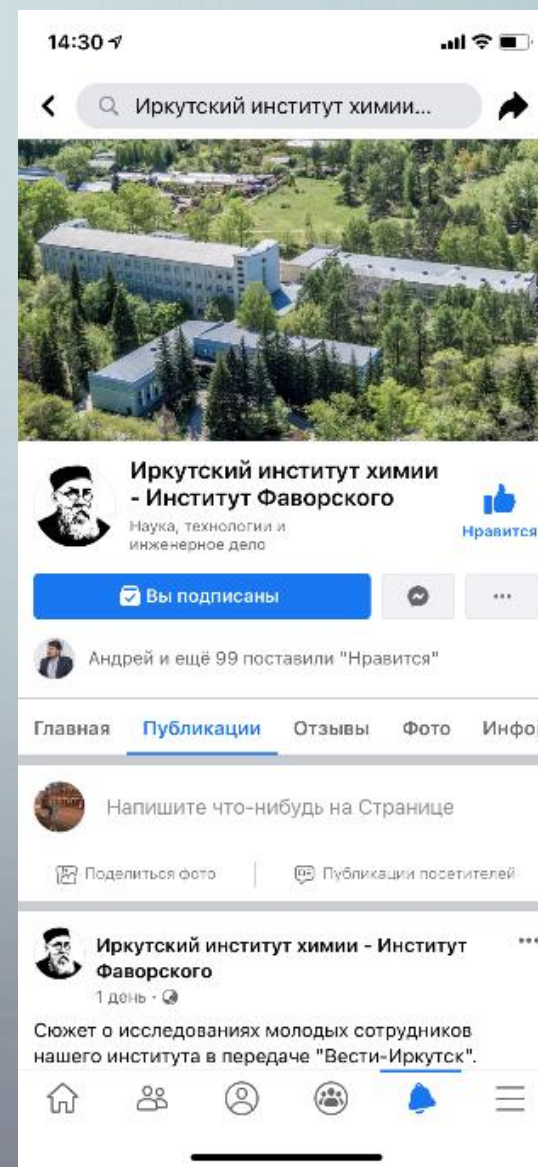
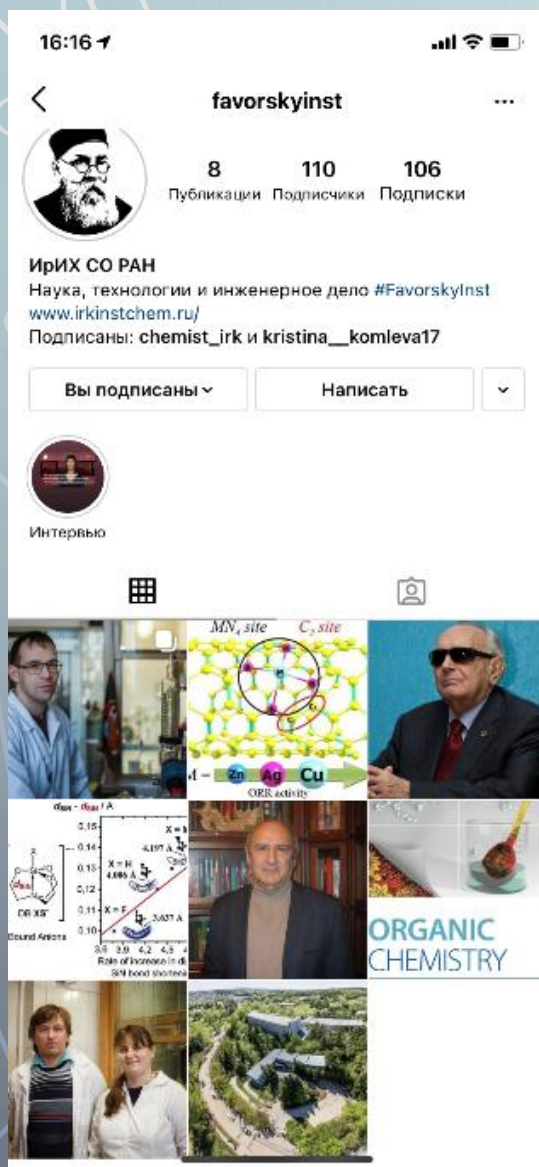
За 2020г. в СМИ было 137 упоминаний Института



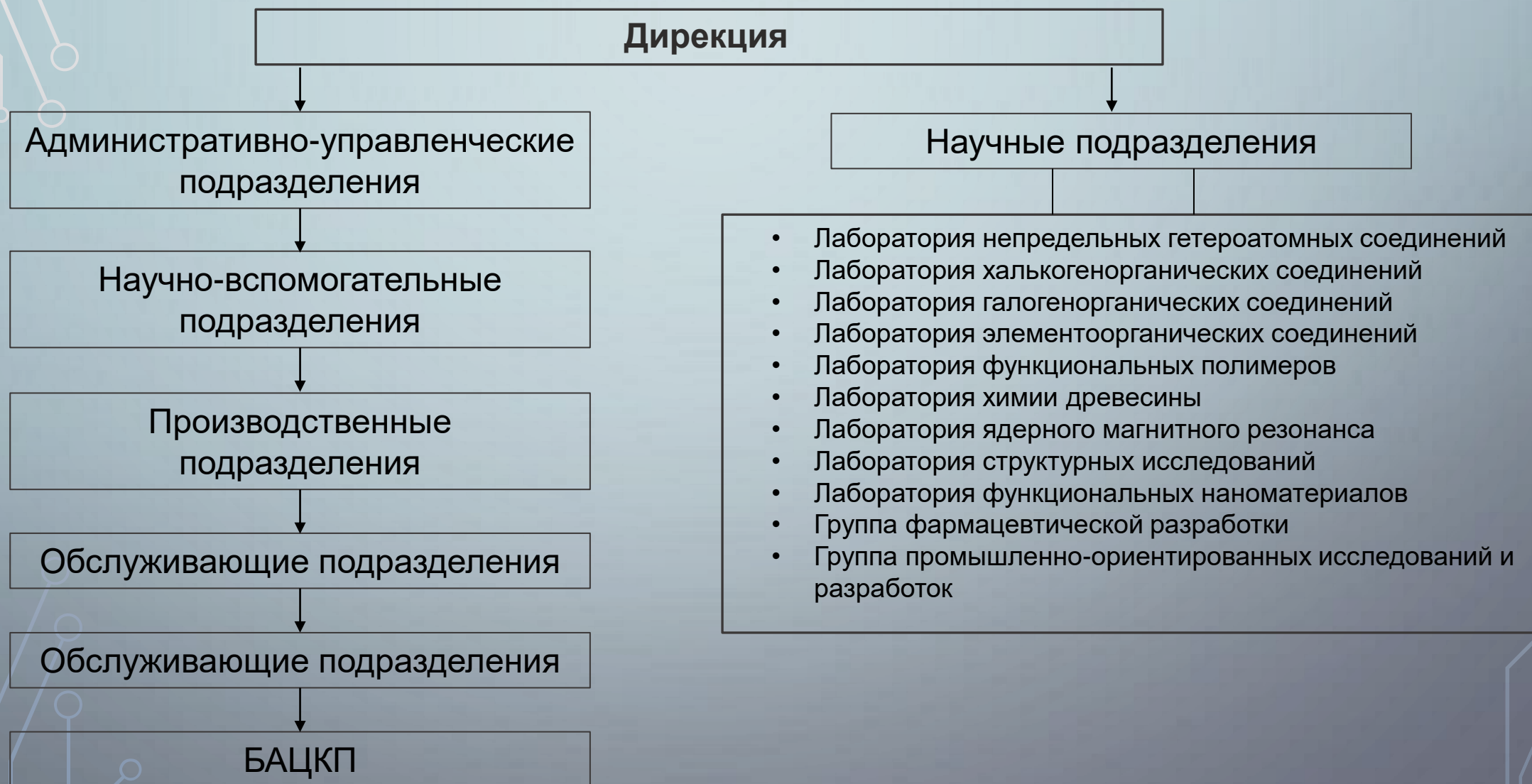
# СМИ и SMM



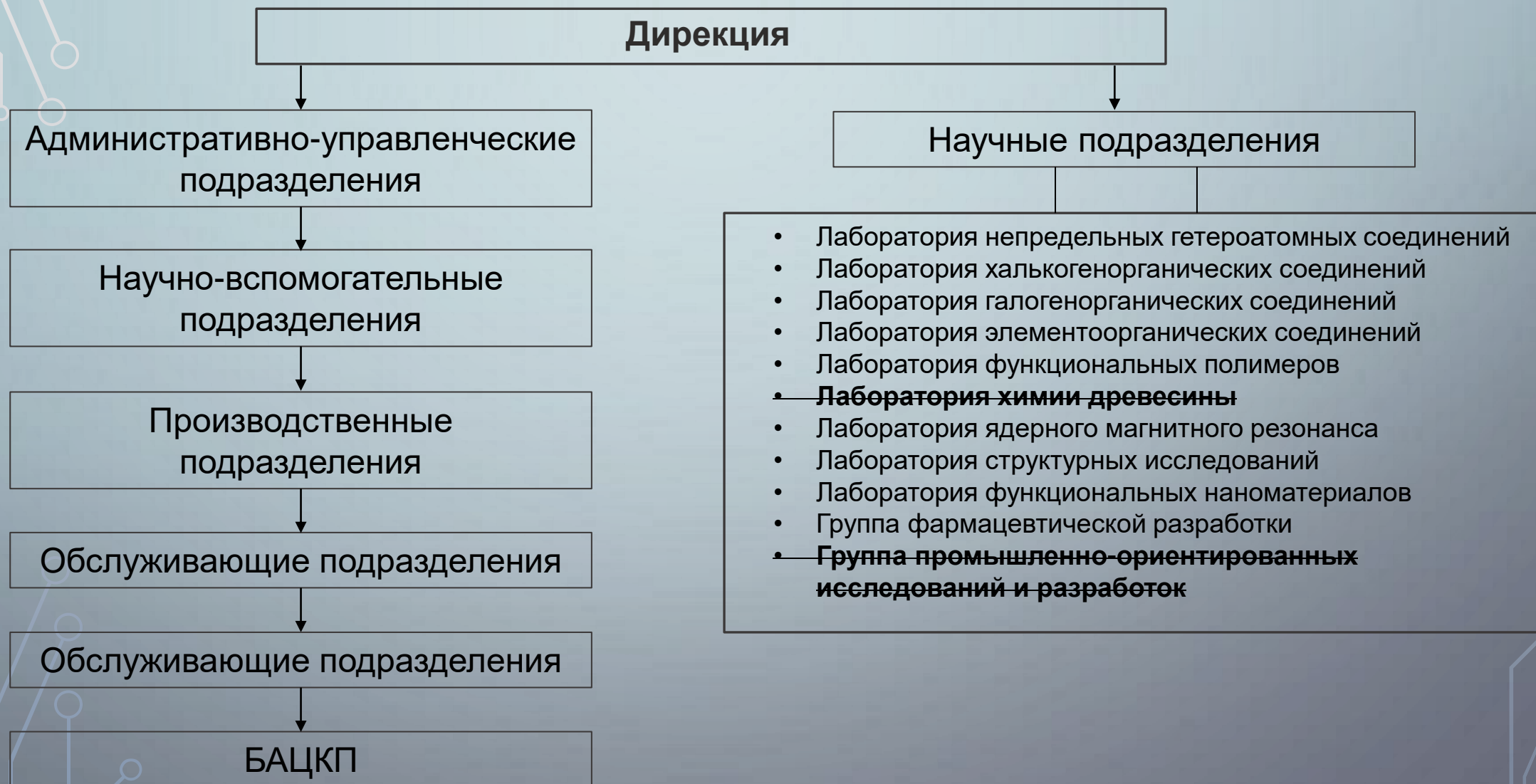
В 2020г. запущены страницы в Instagram, Facebook, Twitter



# Структура Института на начало 2020 года

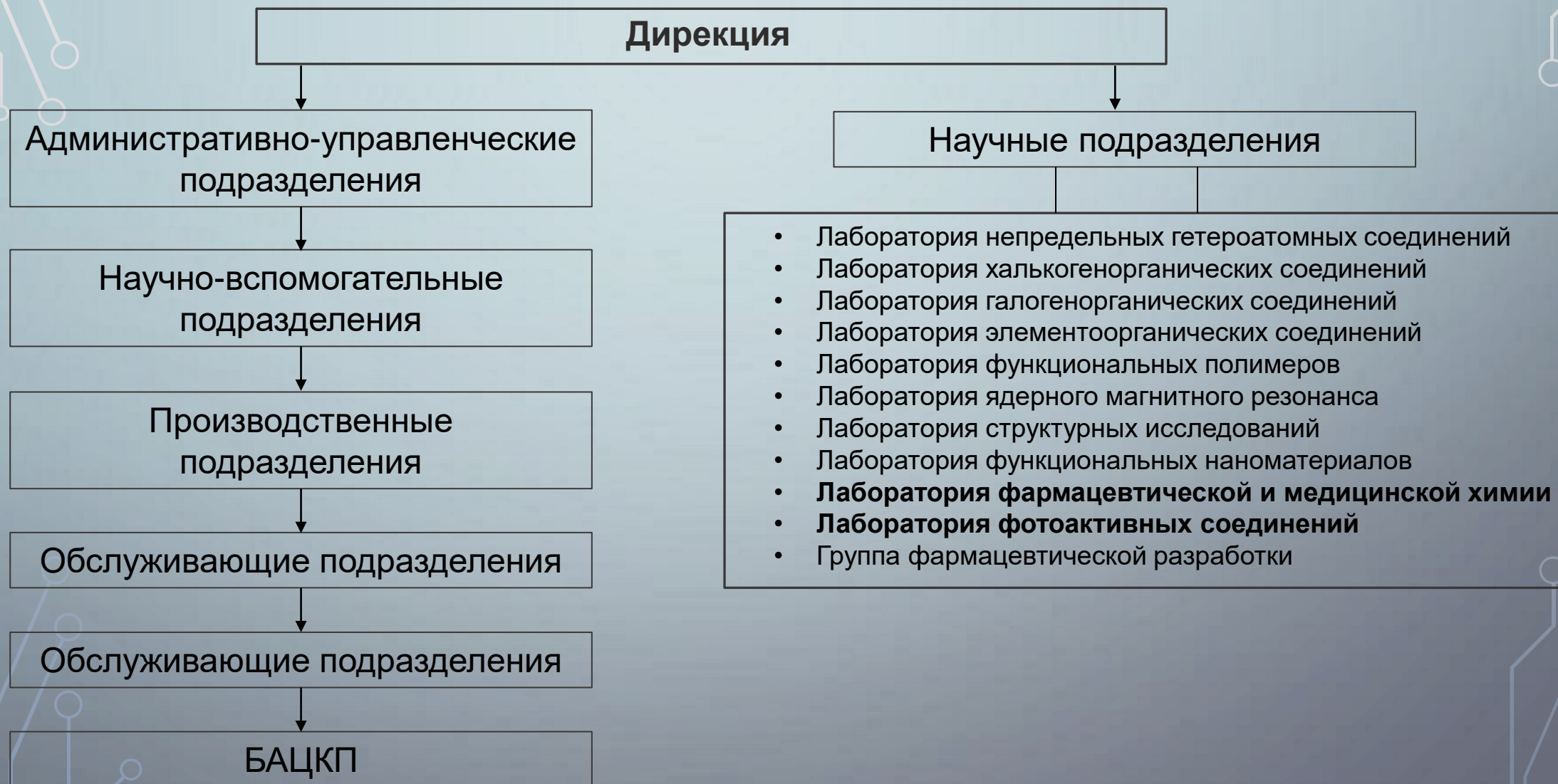
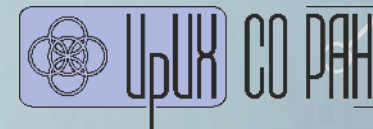


# Структура Института на начало 2020 года



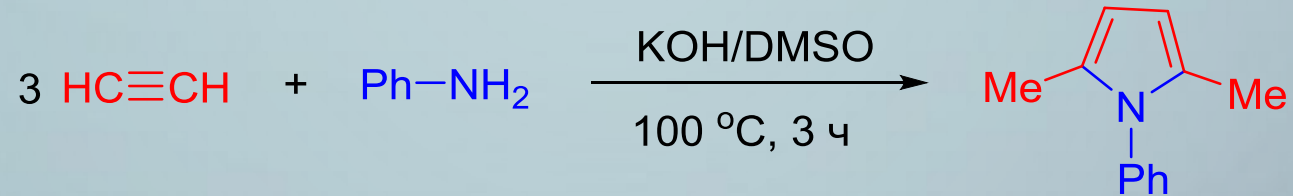


# Структура Института на конец 2020 года



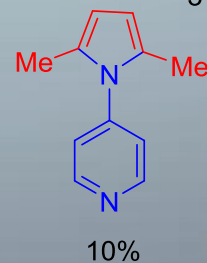
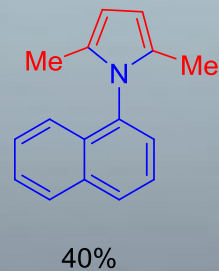
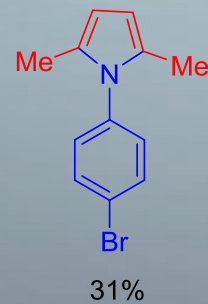
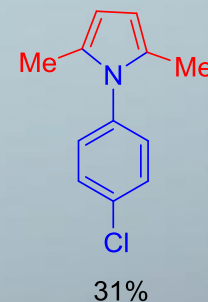
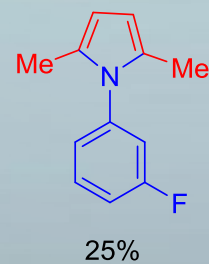
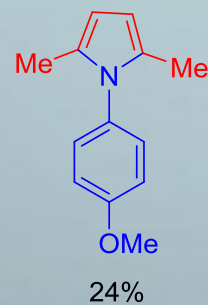
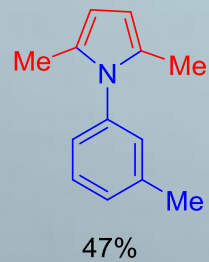
# [3+1]-Самоорганизация ацетилена и ариламинов в 1-арил-2,5-диметилпирролы в суперосновной системе КОН/ДМСО

Schmidt E.Yu., Semenova N.V., Ivanova E.V., Bidusenko I.A., Trofimov B.A. *Mendeleev Commun.* 2020, 30, 109.



63%

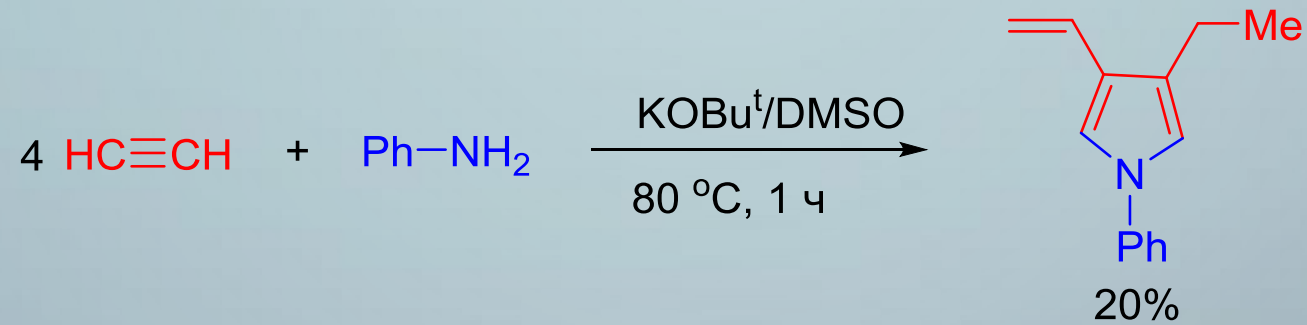
12 примеров



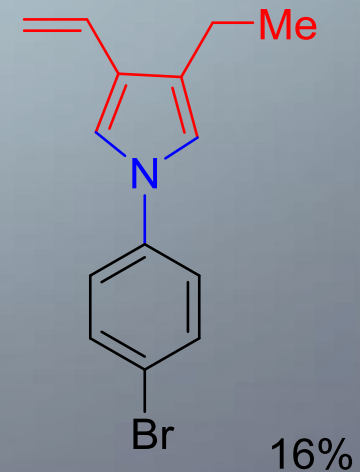
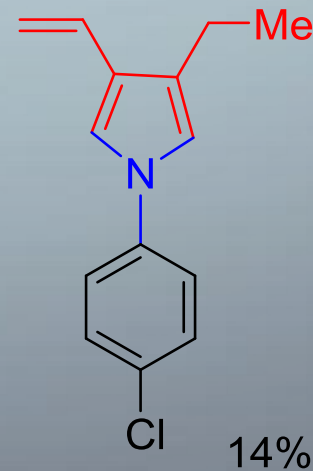
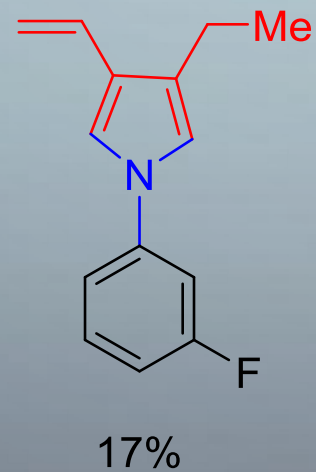
всего 12 примеров

# [4+1]-Самоорганизация ацетилена и ариламинов в 1-арил-3-винил-4-этилпирролы в суперосновной системе $\text{KOBu}^t/\text{DMSO}$

Schmidt E.Yu., Semenova N.V., Ivanova E.V., Ushakov I.A.,  
Trofimov B.A. *Mendeleev Commun.* 2020, 30, 315.



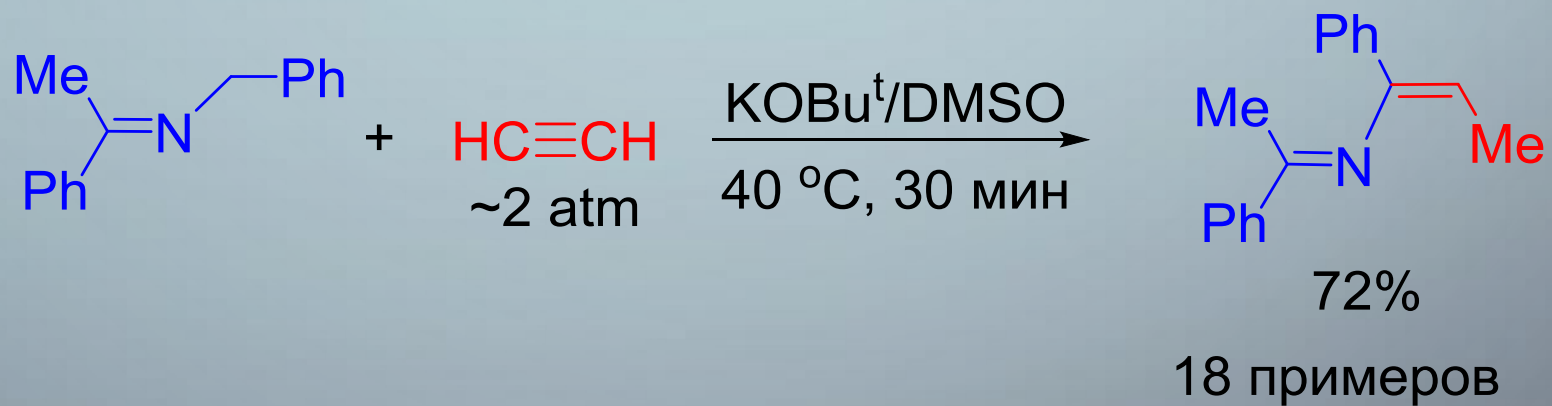
Примеры



# Стереоселективный синтез 1,4-диарил-(*E,Z*)-2-азадиенов из *N*-бензилкетиминов и ацетилена в суперосновной системе KOBu<sup>t</sup>/DMSO

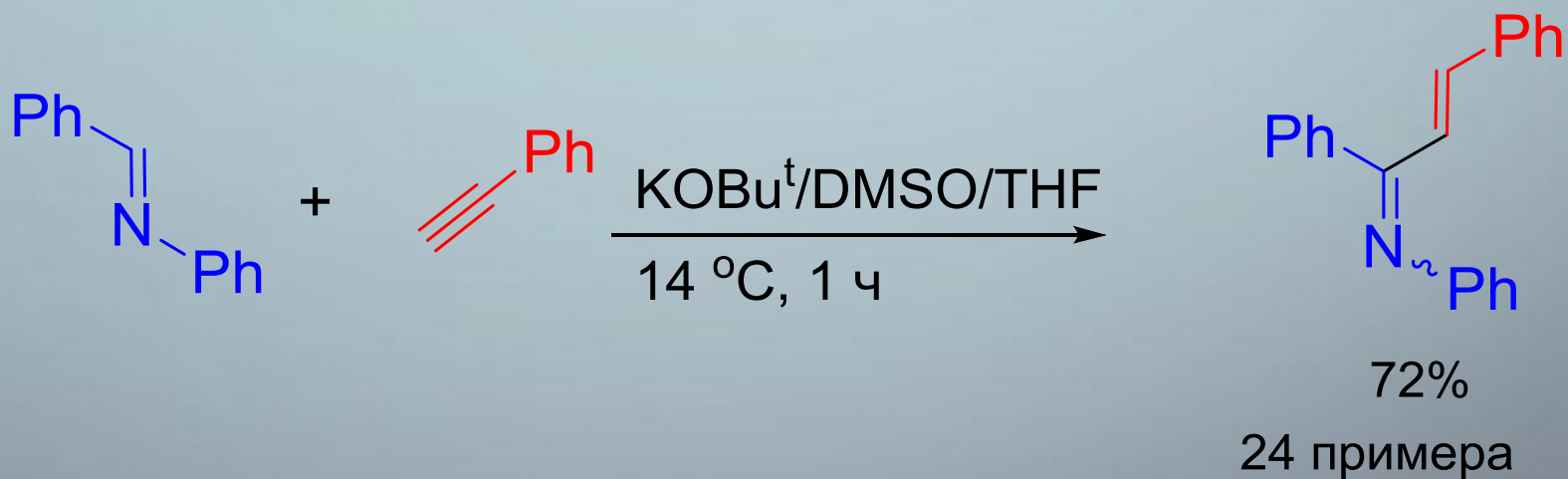


Bidusenko I.A., Schmidt E.Yu., Protsuk N.I., Ushakov I.A.,  
Vashchenko A.V., Afonin A.V., Trofimov B.A. *Org. Lett.* 2020, 22, 2611. IF 6.091. Q1



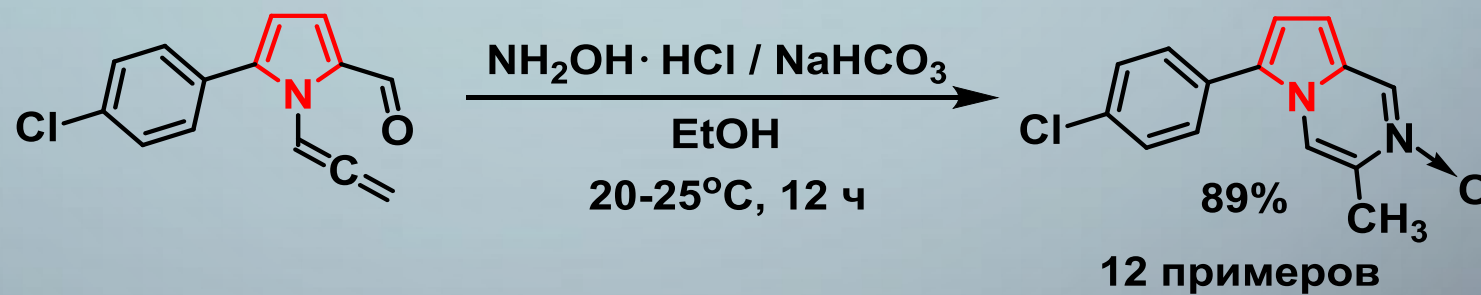
## Формальное винилирование альдиминов ацетиленами в системе KOBu<sup>t</sup>/DMSO: стереоселективный синтез (*E*)-1-азадиенов

Schmidt E.Yu., Bidusenko I.A., Protsuk N.I., Demyanov Y.V.,  
 Ushakov I.A., Vashchenko A.V., Afonin A.V., Trofimov B.A.  
*J. Org. Chem.* 2020, 85, 3417. IF 4.335. Q1



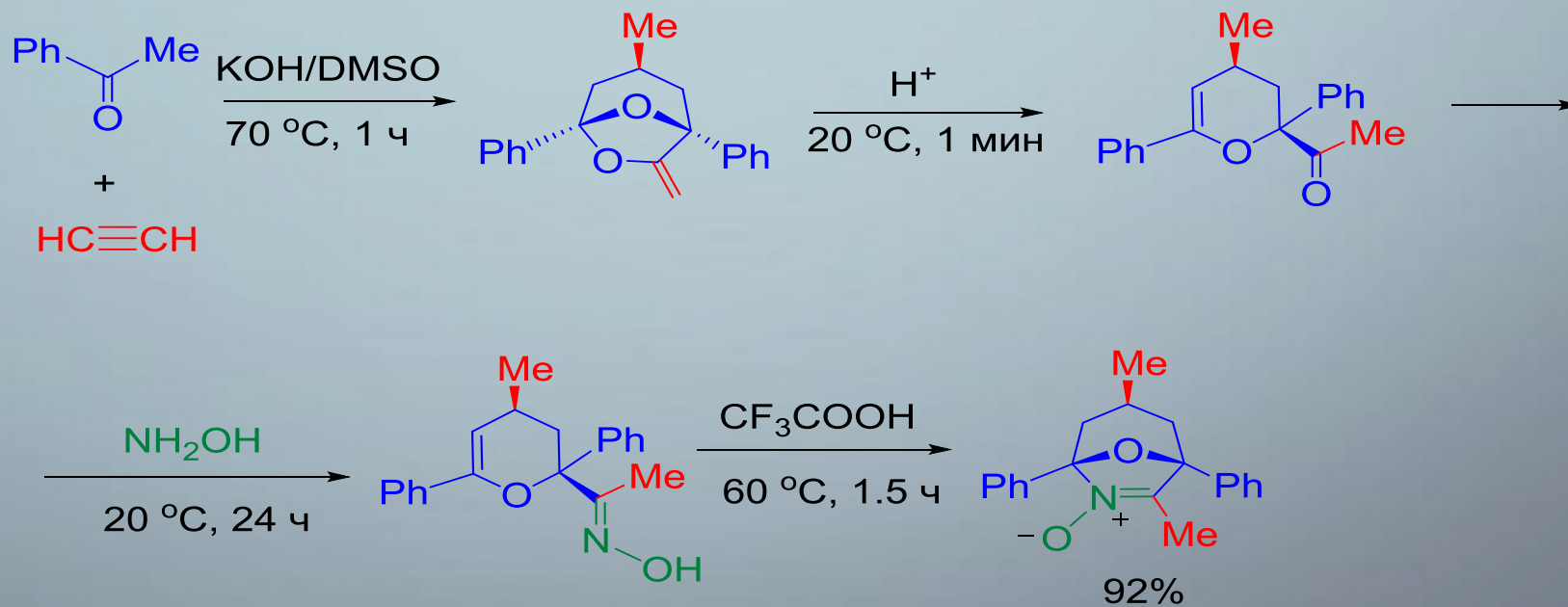
## Пирролопирозин-N-оксиды из 1-алленил-2-ацилпирролов и гидроксиламина

Ivanov A.V., Martynovskaya S.V., Shcherbakova V.S., Ushakov I.A., Borodina T.N., Bobkov A.S., Vitkovskaya N.M. *Org. Chem. Front.* 2020, 7, 4019. IF 5.155. Q1



## Диастереоселективный синтез оксазабициклооктеноксидов (нитронов) из ацетилена, кетонов и гидроксилamina

Schmidt E.Yu., Tatarinova I.V., Ushakov I.A., Vashchenko A.V., Trofimov B.A. *J. Org. Chem.* 2020, 85, 6732. IF 4.335. Q1

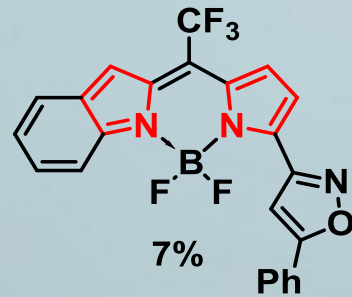


15 примеров

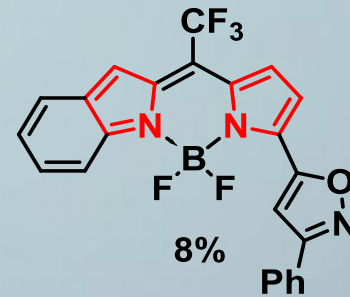




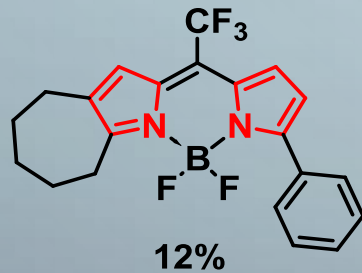
# Новые асимметричные мезо-CF<sub>3</sub>-флуорофоры BODIPY



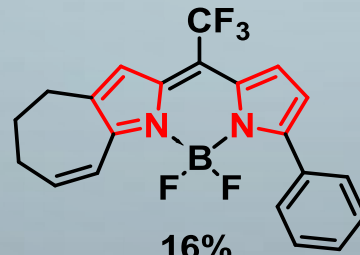
Не флуоресцирует



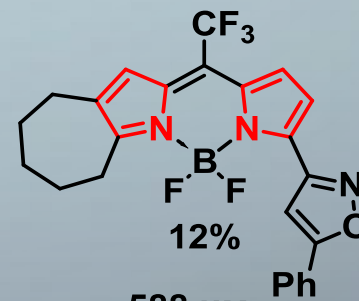
Не флуоресцирует



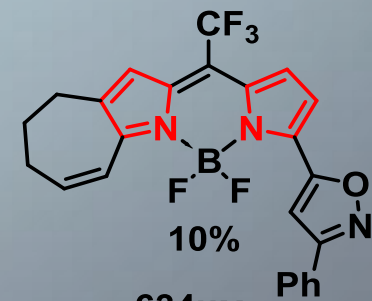
600 нм  
Φ = 0.57



632 нм  
Φ = 0.63



588 нм  
Φ = 0.54



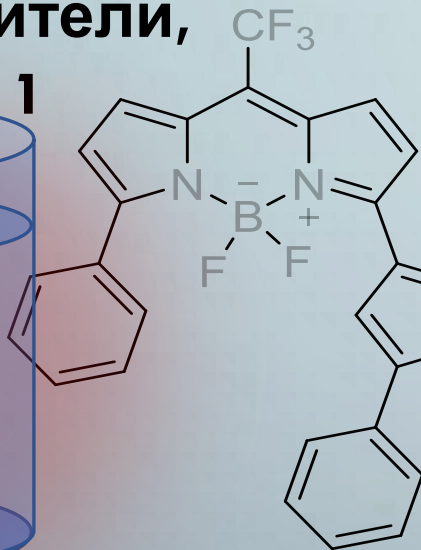
634 нм  
Φ = 0.68

# «ПЕРЕКЛЮЧАЕМЫЙ» ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ ЗОНД НА ОСНОВЕ МЕЗО-CF<sub>3</sub>-ВОДИРУ С ФЕНИЛЬНЫМИ И ПИРАЗОЛИЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

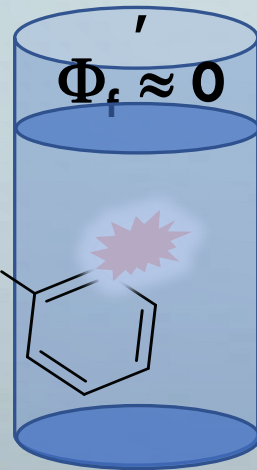
Органические растворители,



$\Phi_f \approx 1$

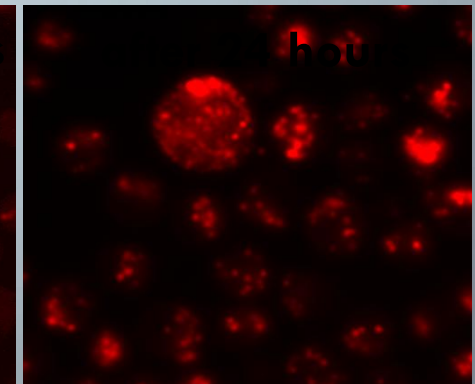
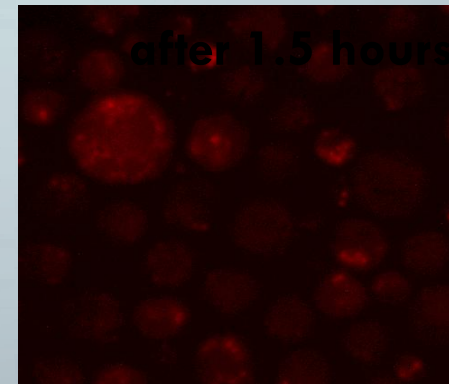


Вода



$\Phi_f \approx 0$

Культура клеток асцитной карциномы Эрлиха



Мономер

Флуоресценция «ON»



Агрегат

Флуоресценция «OFF»



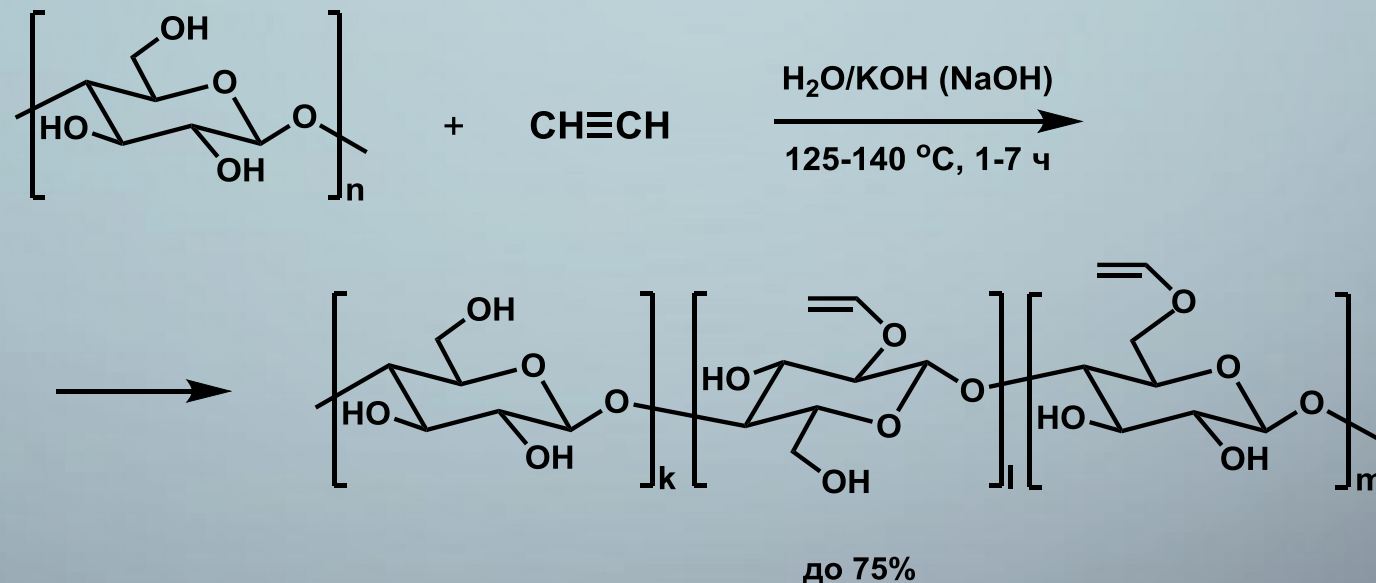
Комплекс с клеткой

Флуоресценция «ON»

# Прямое винилирование целлюлозы ацетиленом в воде в присутствии гидроксидов щелочных металлов



Parshina L. N., Oparina L. A., Tantsyrev A. P.,  
Gusarova N.K., Trofimov B. A. *Cellulose* 2020, 9271. IF 4.210. Q1



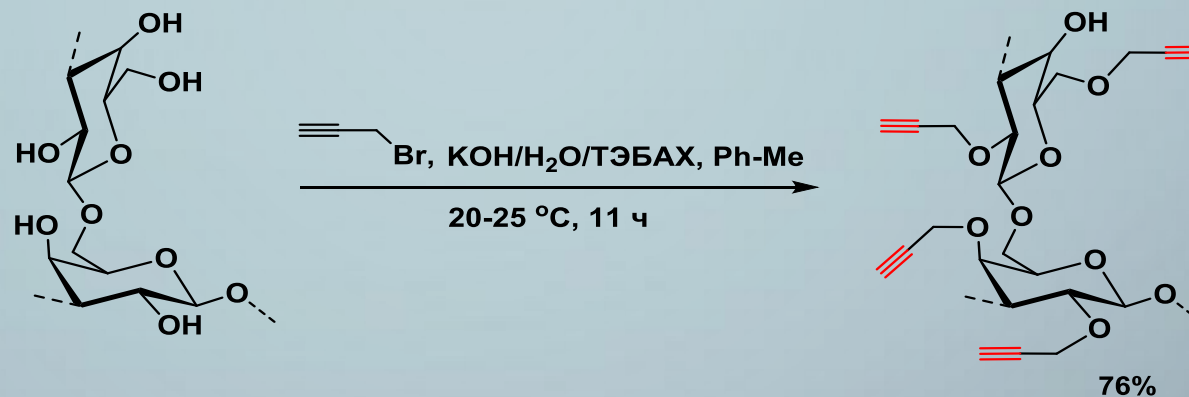
Степень замещения до 0.73 (максимально возможное 3)

В исходных образцах целлюлозы  $n = 350$  или  $1050$ ,  
в винилированной целлюлозе  $(m + l + k) = 130-610$

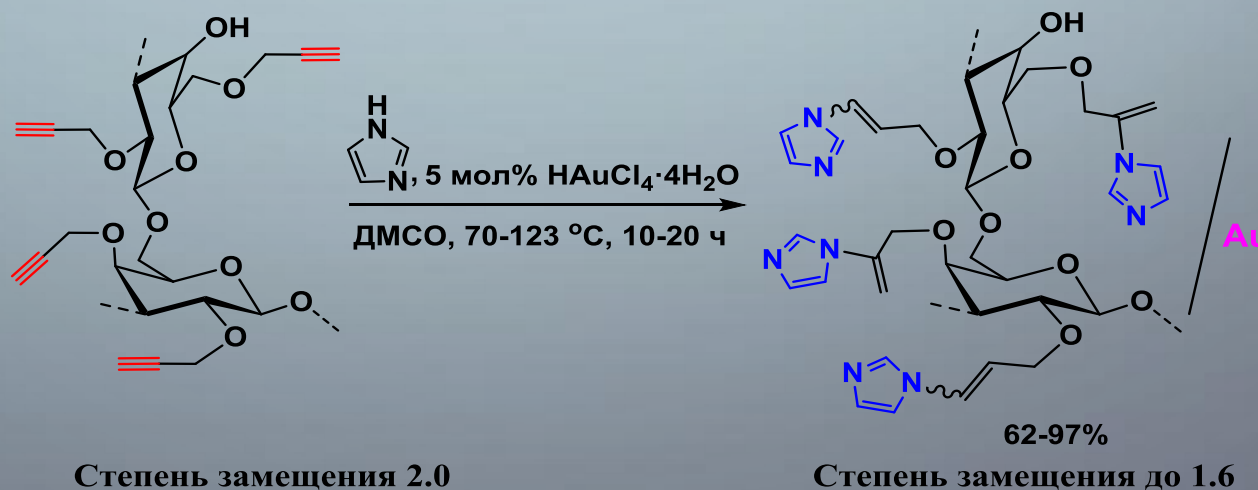
# Пропаргильные эфиры арабиногалактана: Au-катализируемое присоединение имидазолов, Au-содержащие композиты



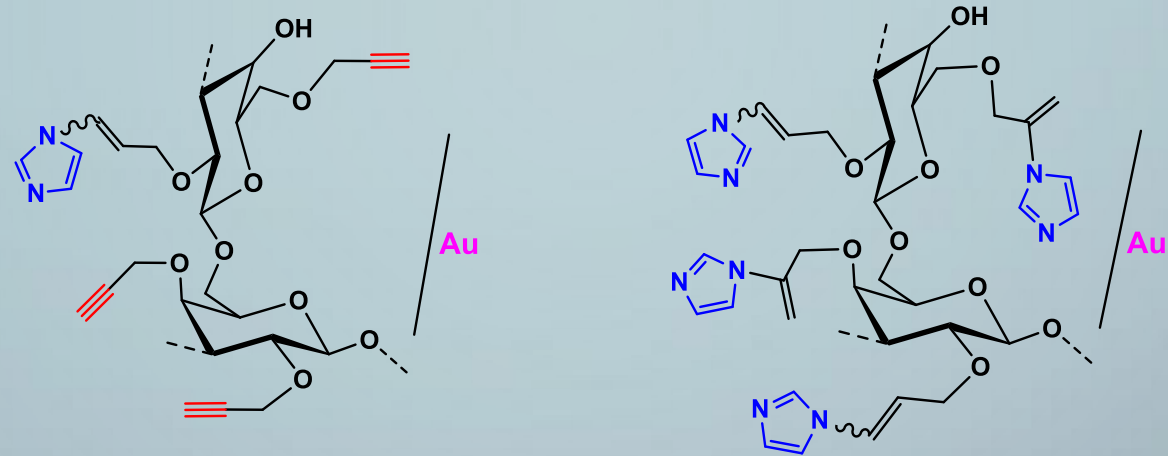
Grishchenko L.A., Parshina L.N., Kanitskaya L.v., Larina L.I.,  
Novikova L.N., Trofimov B.A. *Carbohydr. Res.* 2013, 376, 7.



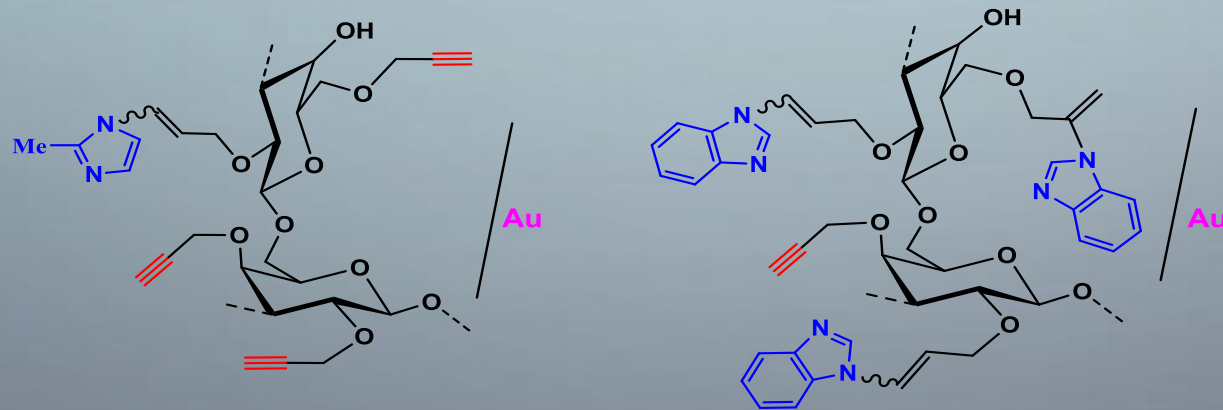
Grishchenko L.A., Parshina L.N., Larina L.I., Belovezhets L.A., Klimenkov I.V., Ustinov A.Yu.,  
Trofimov B.A. *Carbohydr. Polym.* 2020, Article no. 116638. IF 7.182. Q1



## Au-содержащие композиты арабиногалактана, модифицированные винилимидазольными фрагментами



11 образцов: степень замещения 0.5-1.6



Степень замещения ~ 0.7

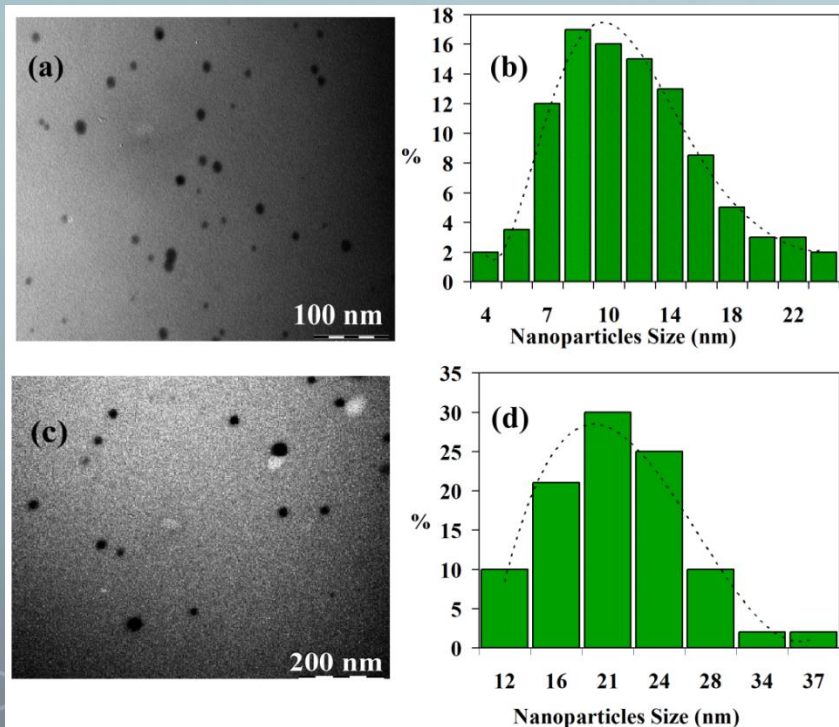
Степень замещения ~ 1.4

Общее содержание Au  
(200-500 нм, Au<sup>0</sup> + Au<sup>+1</sup>) = 4.0-7.2%

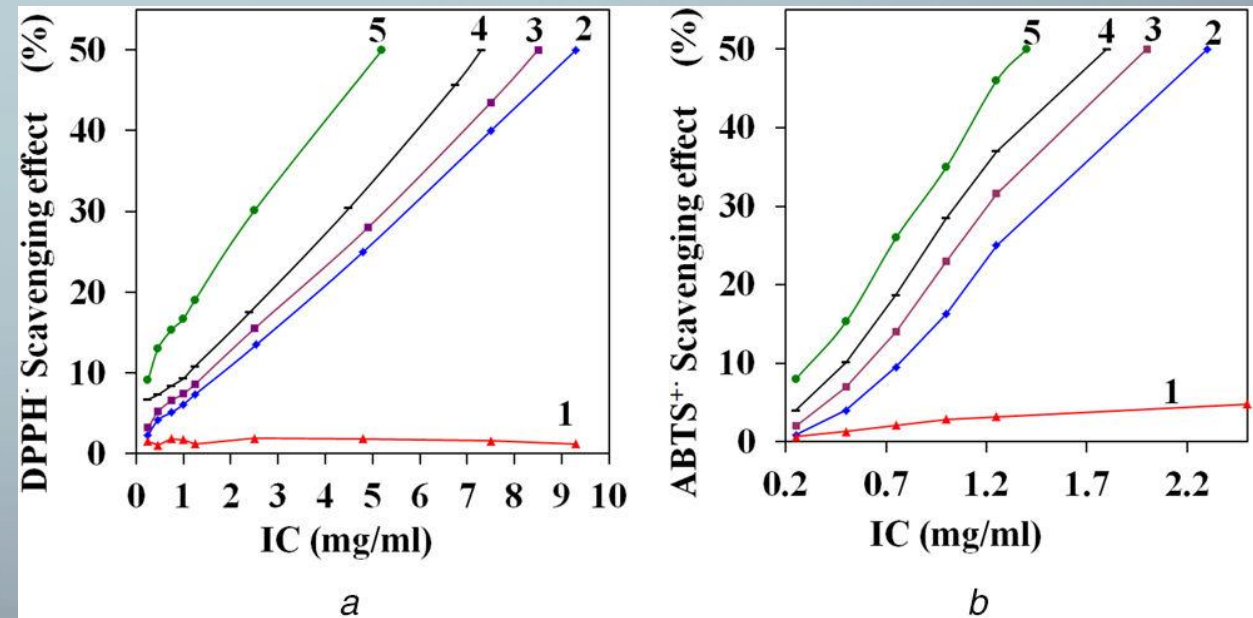
Au<sup>0</sup> = 75%; Au<sup>+1</sup> = 25%

## Синтез и сравнительная оценка антирадикальной активности, токсичности и биораспределения наночастиц селена разного размера, инкапсулированных в матрицу κ-каррагинана: *in vivo* и *in vitro* исследование

*Lesnichaya M., Shendrik R., Titov E., Sukhov B. // IET Nanobiotechnol. – 2020. – V. 14. – I. 6. – P. 519-526. DOI: [10.1049/iet-nbt.2020.0023](https://doi.org/10.1049/iet-nbt.2020.0023)*



ТЭМ-микрофотографии нанокompозитов Se<sup>0</sup>/κ-CG, содержащие (a) 1.5% Se, (c) 3.0% Se и (b, d) диаграммы распределения частиц по размерам



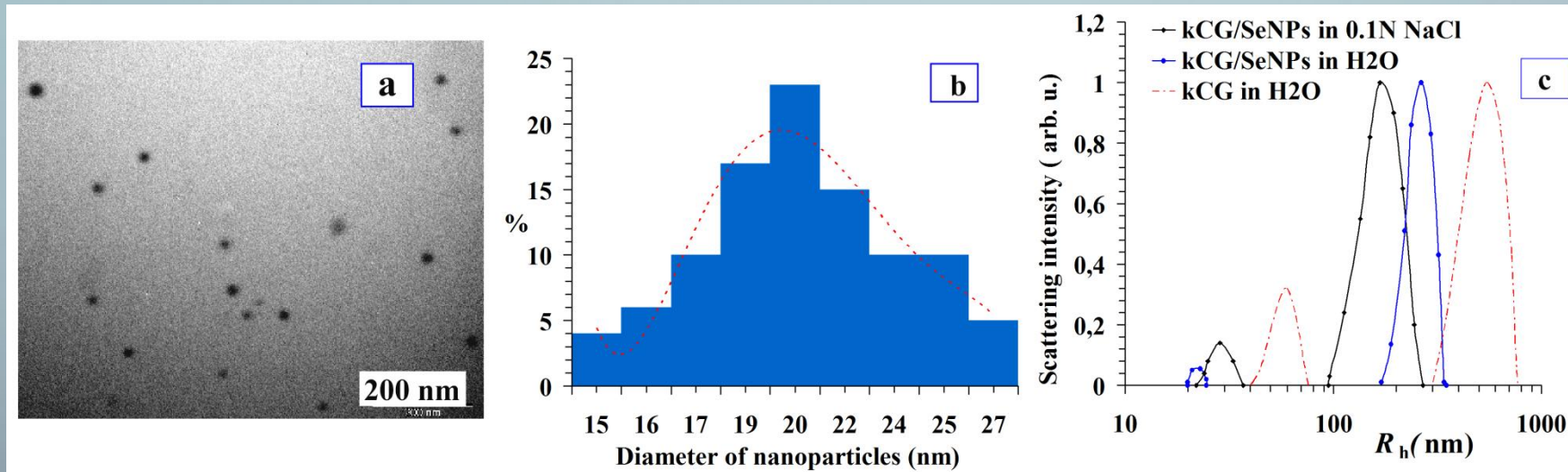
Концентрационная зависимость величины антиоксидантной активности в отношении - (a) DPPH•, - (b) ABTS+• для (1) исходного κ-CG, (2) Se<sup>0</sup>-содержащих нанокompозитов: 0.3 % Se, (3) 0.6 % Se, (4) 1 % Se, (5) 1.5 % Se

ABTS+• = 2,2'-азино-бис(3-этилбензотиазолин-6-сульфо кислота)  
DPPH• = 2,2-дифенил-1-пикрилгидразил

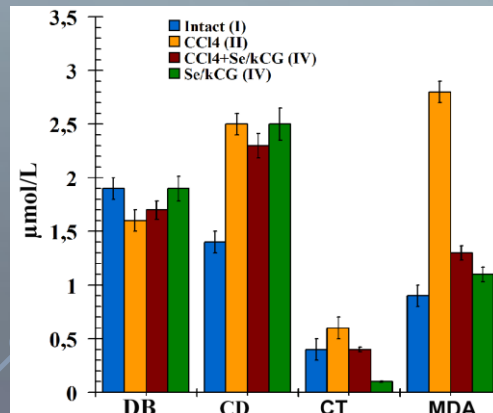
# Исследование влияния высоких доз каррагинан-стабилизированных наночастиц селена на антиоксидантную систему и биохимический профиль крыс при коррекции $CCl_4$ -индуцированного токсического повреждения печени

Lesnichaya M., Karpova E., Sukhov B. // *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. – 2021. – V. 197. – P. 111381 (1-7).

DOI: [10.1016/j.colsurfb.2020.111381](https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2020.111381) (Q1)



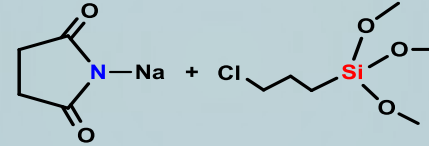
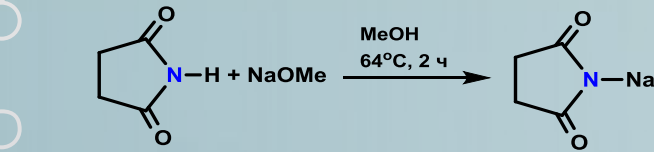
ТЭМ микрофотография – (а),  
 диаграмма распределения  
 частиц по размерам – (b)  
 наночастиц селена в матрице  
 к-каррагенана и зависимость  
 динамического рассеивания  
 света от размера частиц в  
 водном растворе и растворе  
 NaCl – (с)



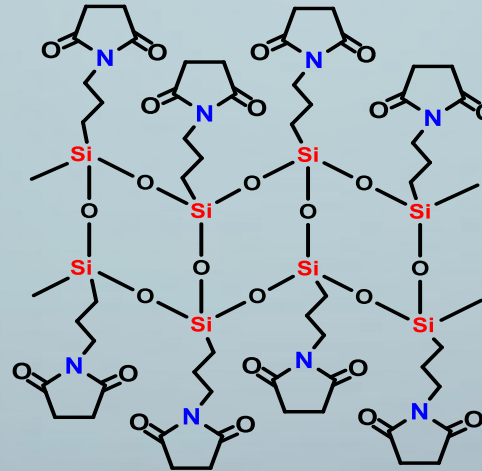
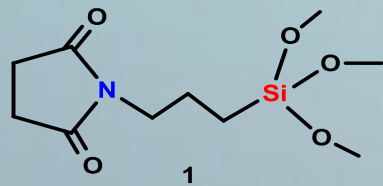
Уровни продуктов пероксидного окисления  
 липида - DB, CD, CT и MDA в сыворотке крови  
 интактных (I) и опытных групп крыс.

CD - конъюгированные диены  
 DB - двойные связи  
 CT - сопряженные триены  
 MDA - малоновый диальдегид

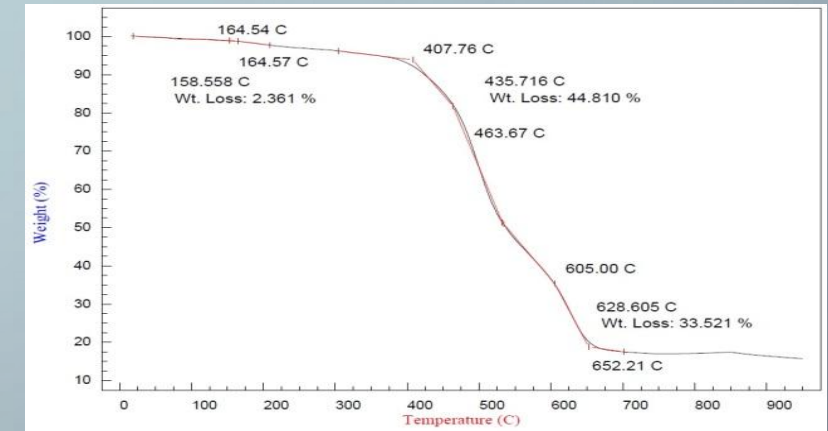
# 1-[3-(ТРИМЕТОКСИСИЛИЛ)ПРОПИЛ]ПИРРОЛИДИН-2,5-ДИОН И СИЛСЕСКВИОКСАН НА ЕГО ОСНОВЕ



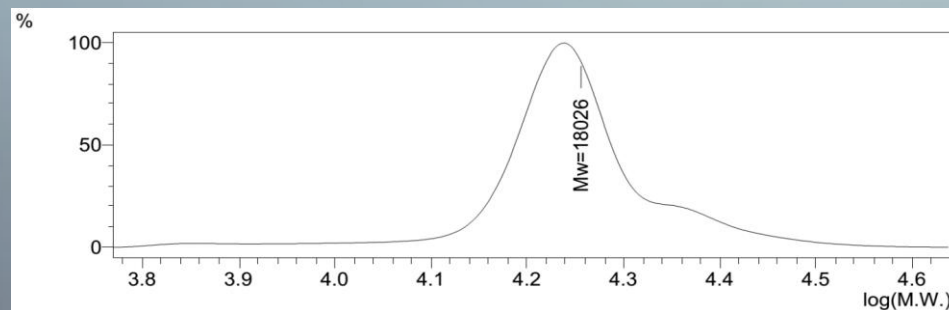
81%



2 (83%)



ТГА кривая 1-[3-(силсесквиоксанил) пропил]пирролидин-2,5-диона

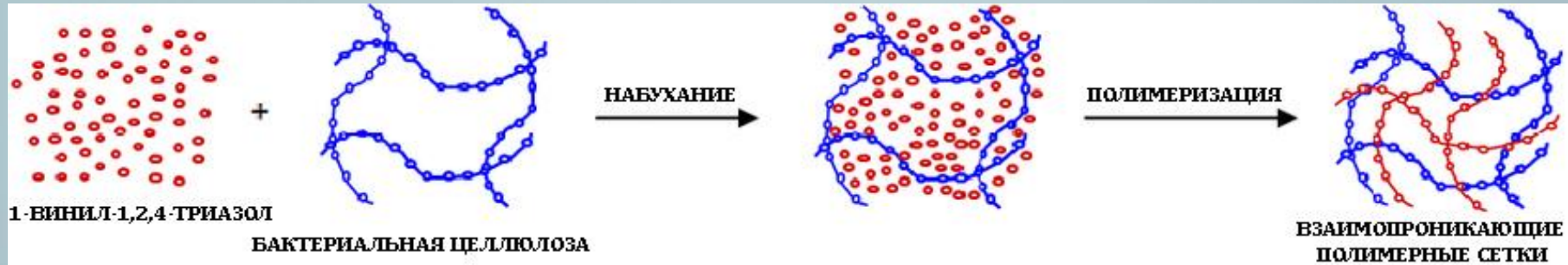


$M_w = 18026$  Да  
 $PDI = 1.05$

Силсесквиоксаны обладают высокой термической стабильностью, гидрофобностью, прозрачностью, низкой диэлектрической проницаемостью. Активно используются в производстве электронных устройств, для функционализации различных поверхностей, создания добавок, повышающих термическую устойчивость материалов и т.д.



# ГИДРОГЕЛИ НА ОСНОВЕ БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ И ПОЛИ-1-ВИНИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛА



## БАКТЕРИАЛЬНАЯ ЦЕЛЛЮЛОЗА

Удерживает воду в виде гидрогеля: 1 гр БЦ - 100 г H<sub>2</sub>O

Высокая диализная проницаемость

Может использоваться как скаффолд

(жесткий молекулярный скелет)

Биосовместимость

## ПОЛИ-1-ВИНИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛ

Молекулярная масса: 2000 - 1000000

Нетоксичность: LD50 > 5000 мг/кг

Комплексообразующая способность

Биосовместимость

Выход: до 98%

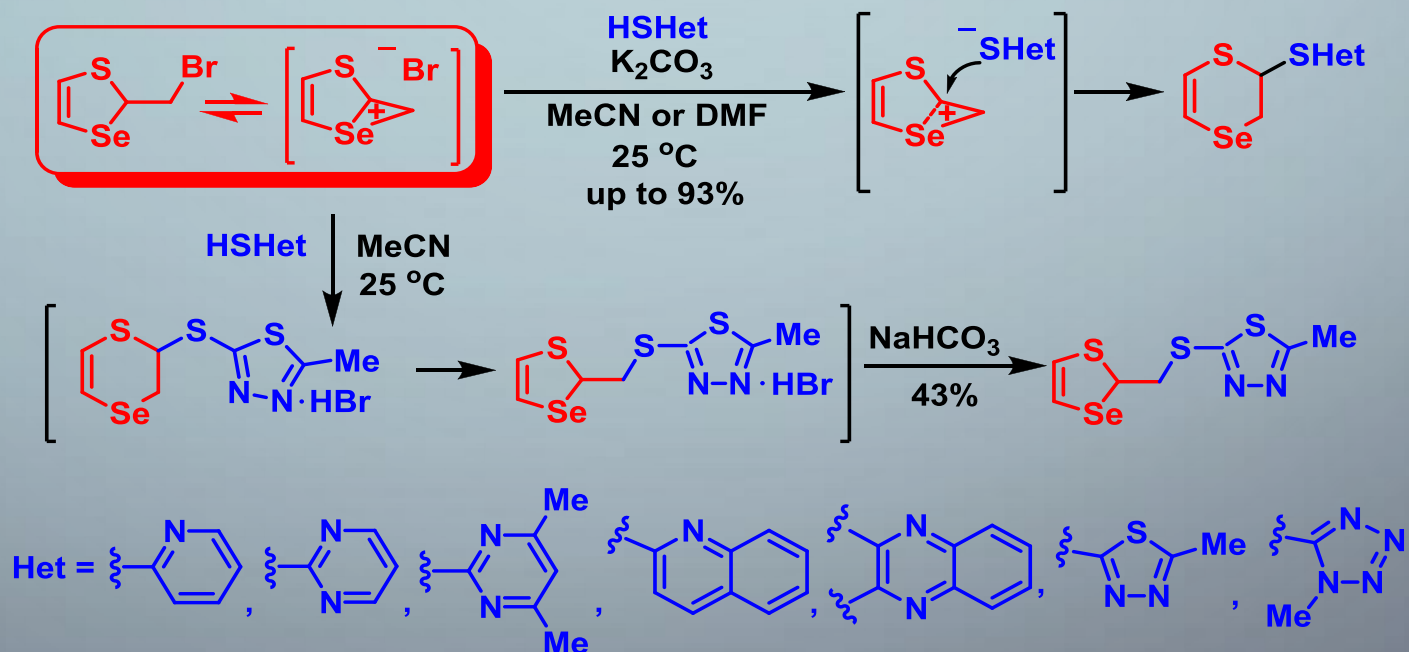
Взаимопроникающие полимерные сетки - двухкомпонентные системы из жесткоцепного полимера (БЦ) и гибкоцепного ПВТ

Гидрогель	Количество МБА, мол.%	Время набухания в реакционном растворе, ч	Содержание H <sub>2</sub> O в гидрогеле, мас.%	Содержание БЦ в сухом остатке, мас.%	Содержание ПВТ в сухом остатке, мас.%	Степень равновесного набухания Q г/г
1	0.2	0.5	98	36	64	0.2
2	0.2	1	98	33	67	0.3
3	0.2	2	98	31	69	0.5
4	0.2	8	80	7	93	1.3
5	0.2	16	80	7	93	1.4
6	0.5	2	78	14	86	1.7
7	0.5	8	77	11	89	1.7
8	—	2	94	26	74	1.4
9	—	8	97	22	78	2.4

Совместно с сотрудниками Института высокомолекулярных соединений РАН (г. Санкт-Петербург)

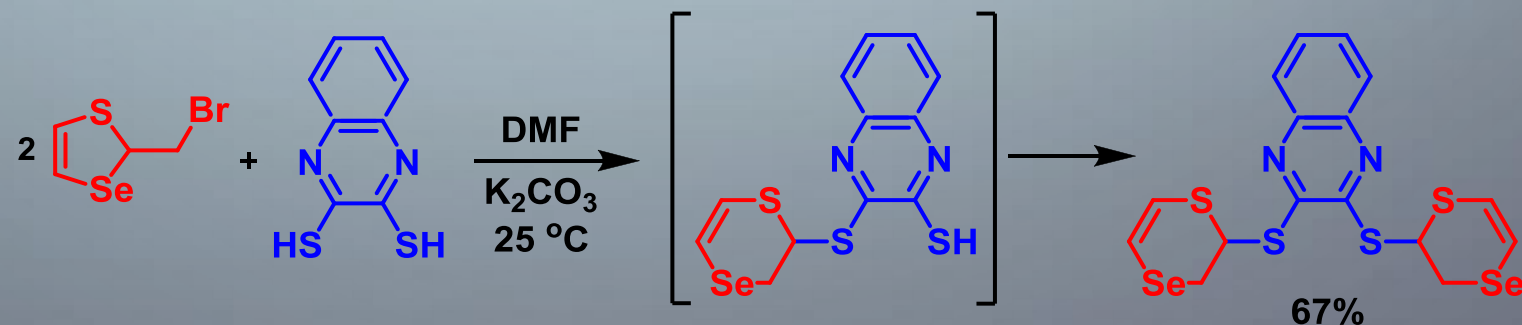
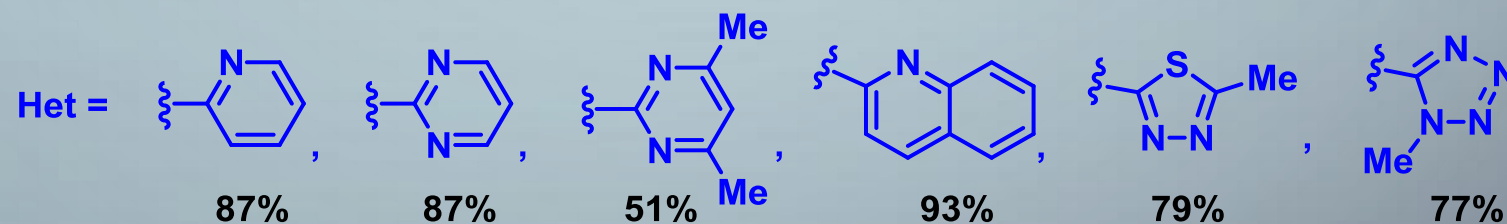
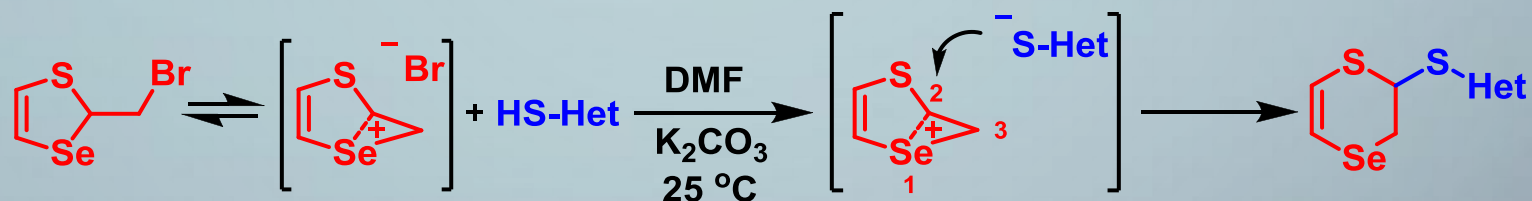
# СИНТЕЗ НОВЫХ СЕМЕЙСТВ 2,3-ДИГИДРО-1,4-ТИАСЕЛЕНИНОВ, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ФАРМАКОФОРНЫМИ АЗОТИСТЫМИ ГЕТЕРОЦИКЛАМИ, НА ОСНОВЕ 2-БРОММЕТИЛ-1,3-ТИАСЕЛЕНОЛА

Amosova, S. V.; Martynov, A. V.; Albanov, A. I.; Potapov, V. A.  
*Chem. Heterocycl. Compd.* 2020, 56, 226.



# РЕАКЦИИ 2-БРОММЕТИЛ-1,3-СЕЛЕНОЛА С МЕРКАПТО-ЗАМЕЩЕННЫМИ ПИРИДИНОМ, ПИРИМИДИНОМ, ХИНОЛИНОМ, 1,3,4-ТИАДИАЗОЛОМ, ТЕТРАЗОЛОМ И ХИНОКСАЛИНОМ

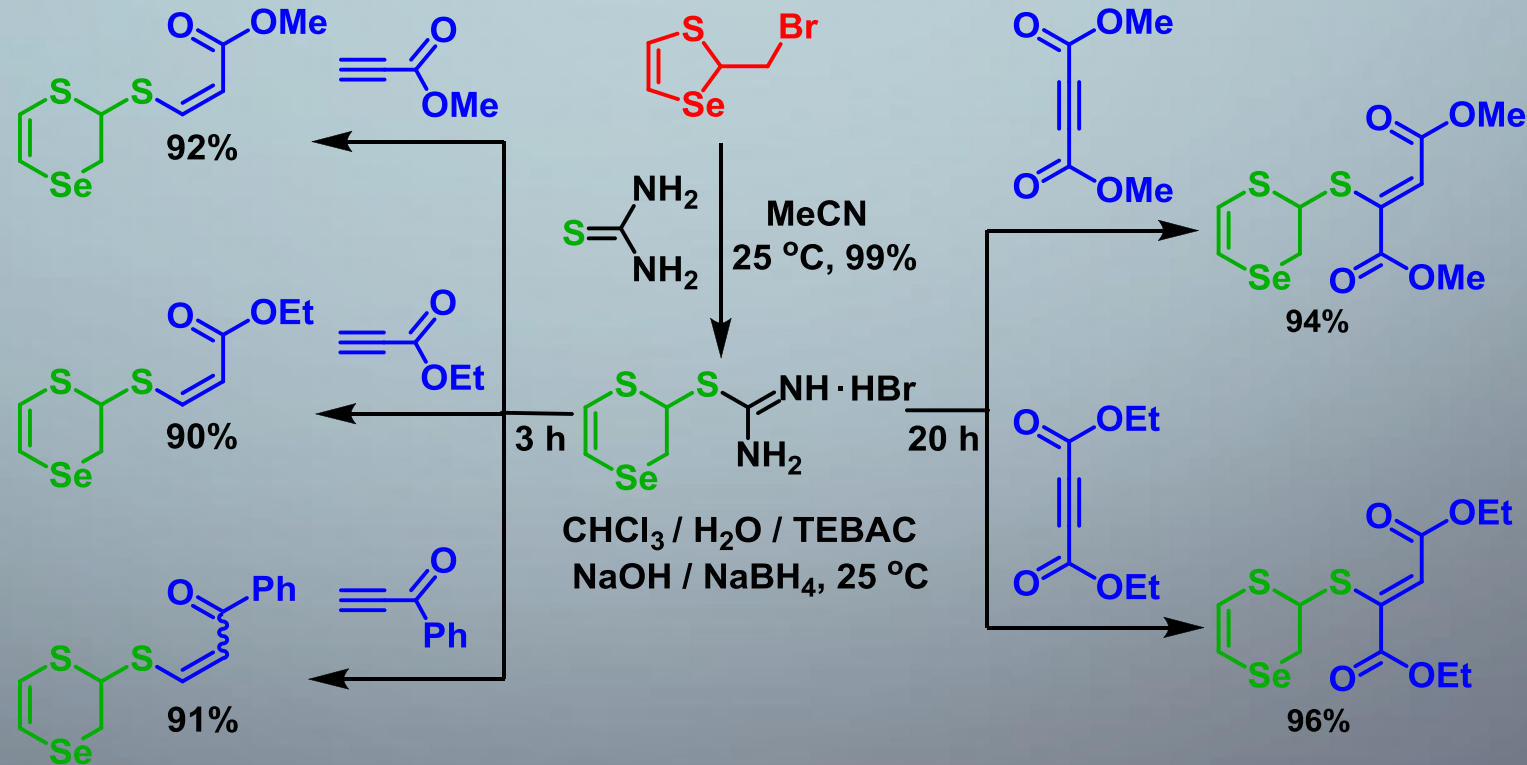
Amosova, S. V.; Martynov, A. V.; Albanov, A. I.; Potapov, V. A.  
*Chem. Heterocycl. Compd.* 2020, 56, 226.



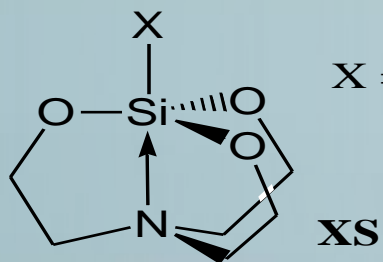
РЕГИО- И СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ  
(Z)-ВИНИЛ(ДИГИДРО-1,4-ТИАСЕЛЕНИН-2-ИЛ)СУЛЬФИДОВ ИЗ  
2-БРОММЕТИЛ-1,3-ТИАСЕЛЕНОЛА  
В УСЛОВИЯХ МЕЖФАЗНОГО КАТАЛИЗА



Filippov A. S.; Amosova S. V.; Potapov V. A.  
*Chem. Heterocycl. Compd.* 2020, 56, 1237.



# “Стоящие вне закона” дипольно-связанные (ДС) анионы внутримолекулярных комплексов кремния



X = Me (MeS), H (HS),  
F (FS), Cl (ClS)

Sidorkin V.F., Belogolova E.F., Doronina E.P., Liu G., Ciborowski S.M.,  
Bowen K.H. *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142, 2001–2011.

## ➤ КЛАССИЧЕСКИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ОБ ОБРАЗОВАНИИ И СТРУКТУРЕ ДС АНИОНОВ

- (I) Образование ДС анионов контролируется высокой полярностью исходной нейтральной молекулы (“критическое” значение дипольного момента  $\mu = 2.5$  Д)
- (II) Присоединение дополнительного электрона (ДЭ) к полярной молекуле (локализованного вне её ядерного остова) практически не оказывает влияния на исходную структуру
- (III) При небольших изменениях геометрии межмолекулярных комплексов под воздействием ДЭ, в фотоэлектронных спектрах (ФЭС) их ДС анионов обязательно наблюдается колебательная сигнатура

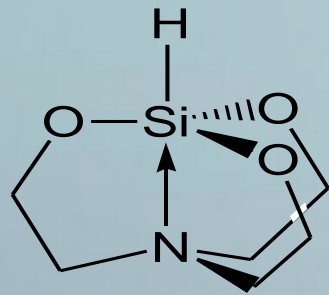
## ➤ НАШ ВКЛАД В ОБЩУЮ ТЕОРИЮ СТРОЕНИЯ ДС АНИОНОВ (НА ПРИМЕРЕ XS<sup>-</sup>)

- (I) Образование ДС анионов с каркасной структурой XS<sup>-</sup> контролируется не только “критическим” значением  $\mu$ , но и геометрическим фактором
- (II) При переходе от XS к XS<sup>-</sup> наблюдается беспрецедентное сокращение межъядерного расстояния Si...N
- (III) Отсутствие колебательной структуры в ФЭС XS<sup>-</sup> не является свидетельством сохранения геометрии молекулы XS при прилипании к ней ДЭ

# Роль геометрического фактора в образовании ДС анионов каркасных молекул



структура со связью SiN,  
пирамидальный азот



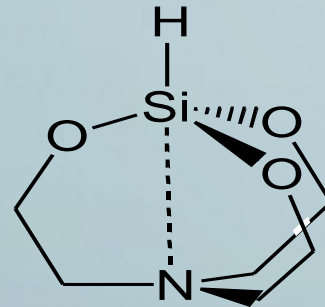
**HS**

$$d_{\text{SiN}} = 2.417 \text{ \AA}$$

$$\mu = 6.06 \text{ Д}$$

$$\text{VDE} = 0.045 \text{ эВ}$$

структура без связи SiN  
плоский азот



**HS<sup>-</sup>**

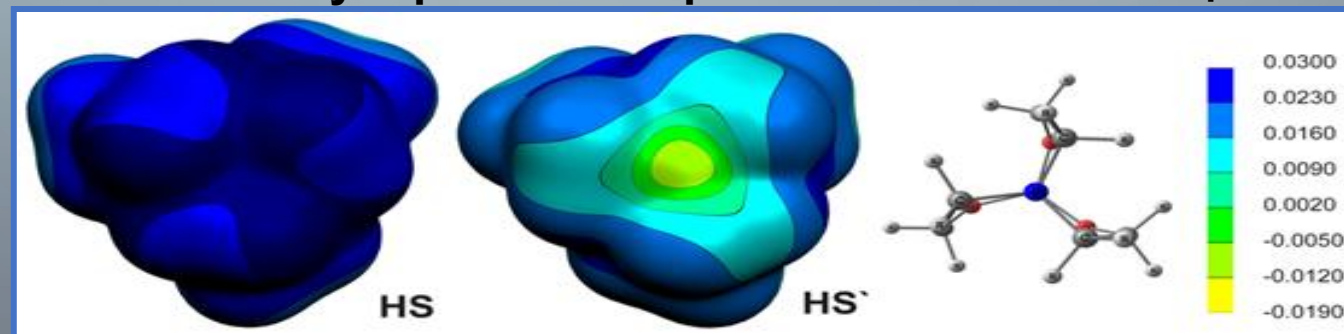
$$d_{\text{SiN}} = 3.000 \text{ \AA}$$

$$\mu = 3.39 \text{ Д}$$

$$\text{VDE} = -0.006 \text{ эВ}$$

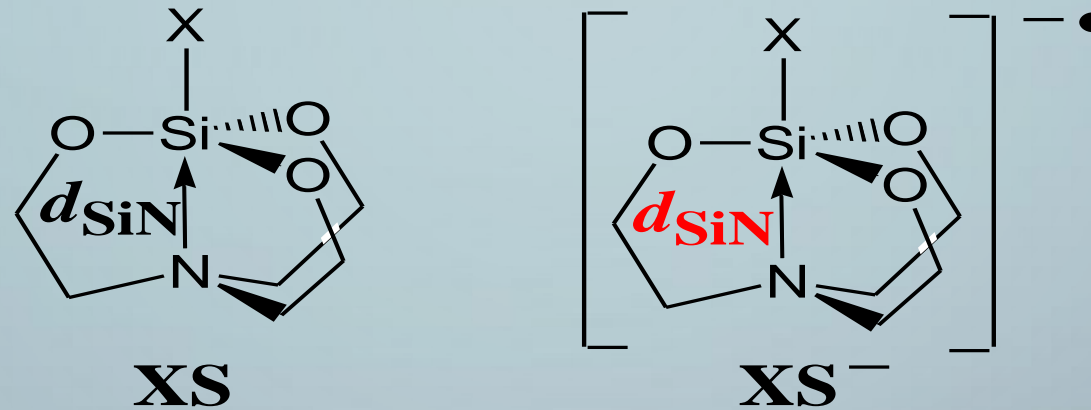
Образование ДС анионов (вертикальная энергия отщепления электрона  $\text{VDE} > 0$  эВ) с каркасной структурой контролируется не только “критическим” значением  $\mu = 2.5$  Д, но и геометрическим фактором, в качестве которого выступает степень пирамидализации атома азота

Молекулярный электростатический потенциал



MP2/B2(s), CCSD/6-31++G(d,p), UCCSD(T)/B2//UMP2/B2(s)

## Изменение геометрии каркасных молекул силатранов под влиянием добавочного электрона



$$\Delta d_{\text{SiN}} = d_{\text{SiN}}^{\text{XS}} - d_{\text{SiN}}^{\text{XS}^{\bullet-}}$$

$$\underline{\Delta d_{\text{SiN}} = 0.1 \text{ \AA} - 0.15 \text{ \AA}!}$$

При переходе от XS к ДС XS<sup>•-</sup> наблюдается рекордное сокращение длины контакта Si···N

MP2/B2(s), CCSD/6-31++G(d,p), фотоэлектронная спектроскопия, газовая электронография

# ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ORR НА НАНОУГЛЕРОДНЫХ КАТАЛИЗАТОРАХ



ERA.Net # 506 – HeDoCat

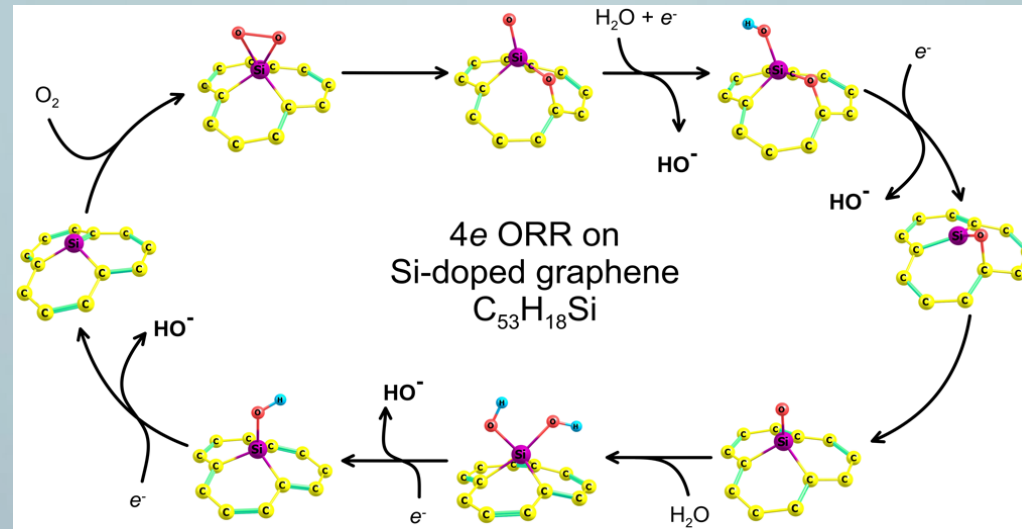
wB97XD/6-31G\*

## Принцип Сабатье

СВЯЗЬ  $E_{ads}$  С КАТАЛИТИЧЕСКОЙ  
АКТИВНОСТЬЮ

ORR – 2e или 4e?

4e -процесс



Теоретический анализ ORR выявил три возможных пути реакции. Первый – общепринятый путь через протонирование  $HO_2^*$  до  $O^*$ ; Второй, новый путь, включает протонирование  $HO_2^*$  до  $HO^*HO^*$ . Он на 0.15–0.28 эВ предпочтительнее. Третий путь, тоже новый, включает внедрение атома кислорода в связь Si–C. Он наиболее предпочтителен, на 0.5–1.09 эВ.

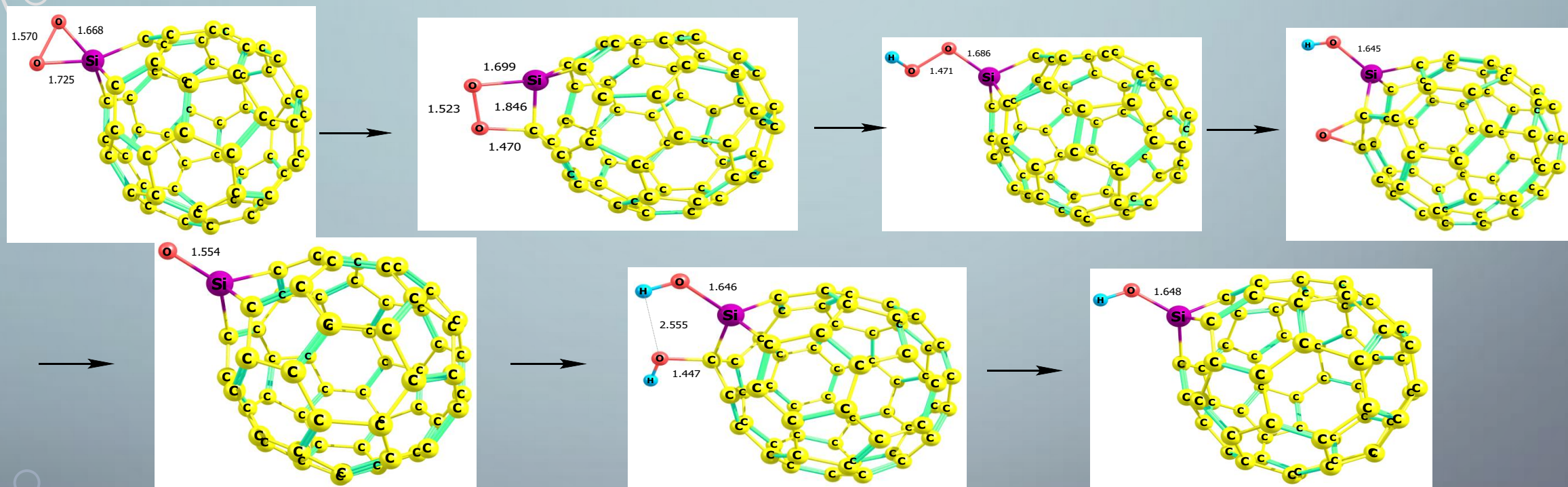
Таким образом, Si-допированный графен с трехкоординированным атомом кремния может быть эффективным катализатором ORR.



# ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ORR НА Si-ДОПИРОВАННОМ ФУЛЛЕРЕНЕ



Доказана ошибочность вывода о неэффективности Si-допированного фуллере́на как катализатора ORR (*Carbon* **2017**, *114*, 393) из-за методологической ошибки авторов. Катализатор эффективен как в кислой, так и в щелочной среде.



Kuzmin A.V., Shainyan V.A. *ACS Omega*. **2020**. *5*, 15268–15279.

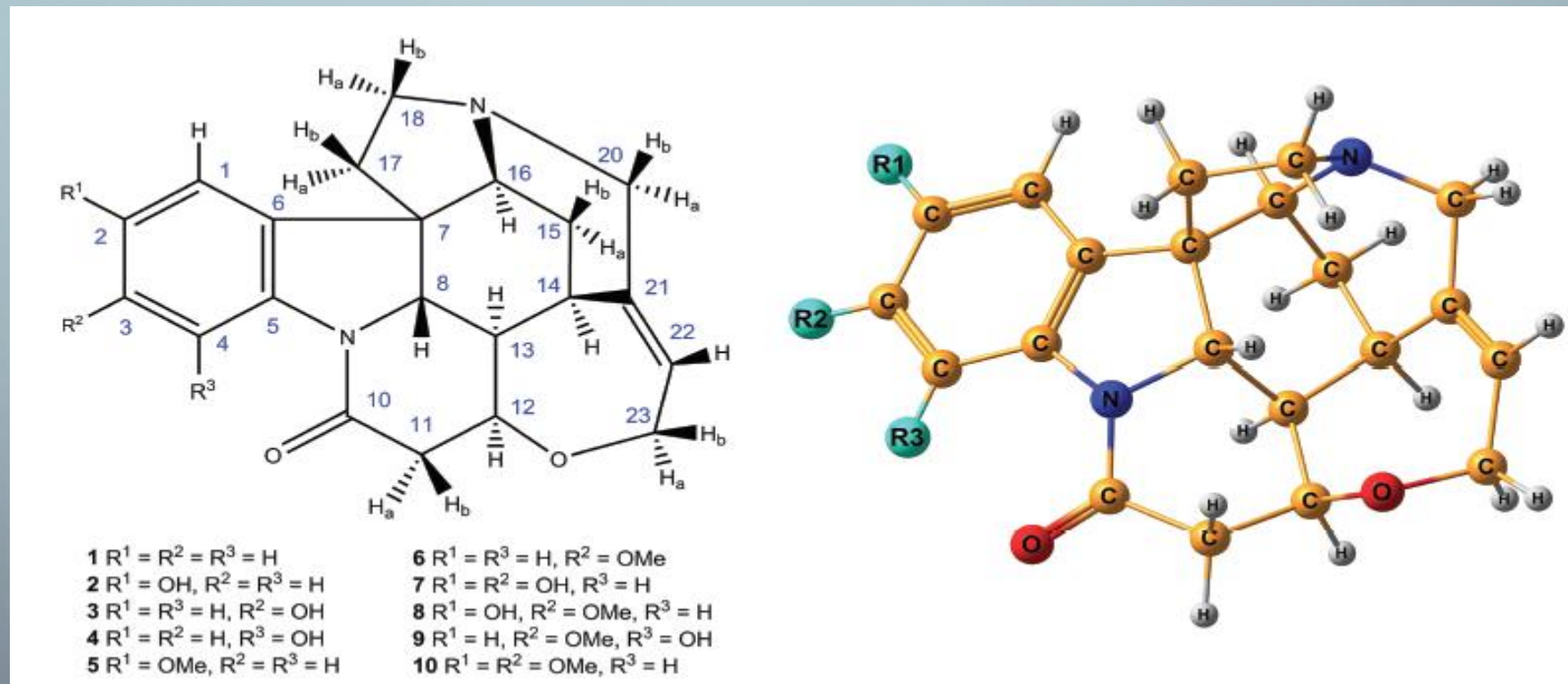
Ващенко А.В., Кузьмин А.В., Шаинян Б.А. *ЖОХ*. **2020**. *90*, 483–489.

Kuzmin A.V., Shainyan V.A. *ACS Omega*. **2021**. *6*, 374–387.

Vashchenko A.V., Kuzmin A.V., Shainyan V.A. *Int. J. Quant. Chem.* **2021**. *121* (online).

# Предсказание химических сдвигов стрихнина

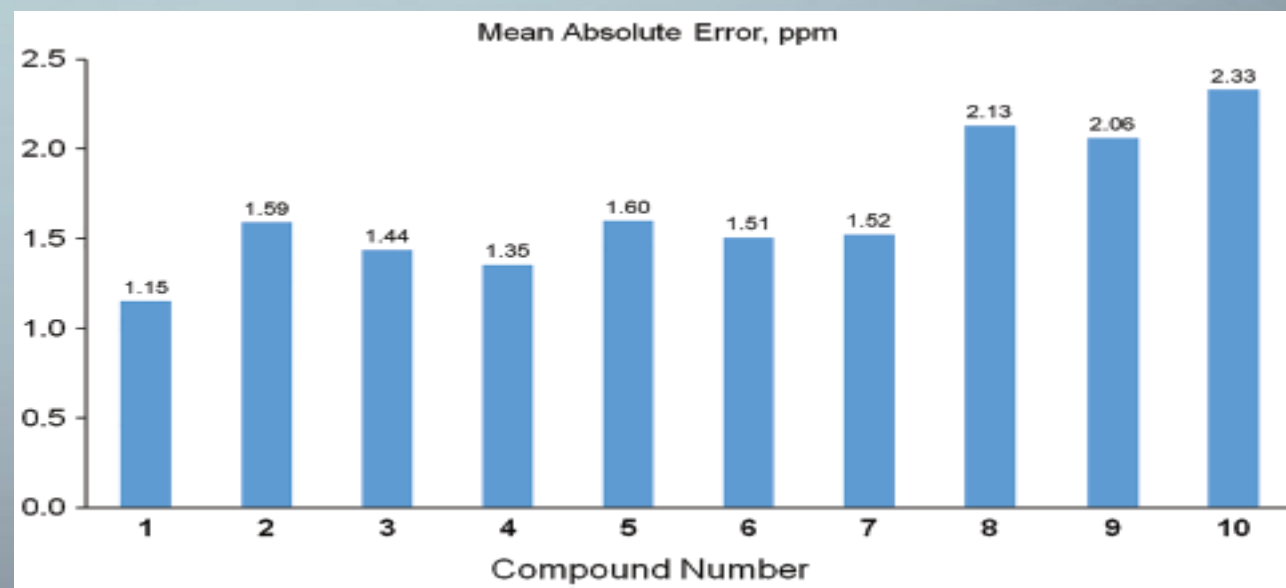
Semenov V.A., Samultsev D.O., Krivdin L.B. The  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts of *Strychnos* alkaloids revisited at the DFT level // Magn. Reson. Chem. – 2020. – V. 58. – P. 532–539.



## Предсказание химических сдвигов стрихнина

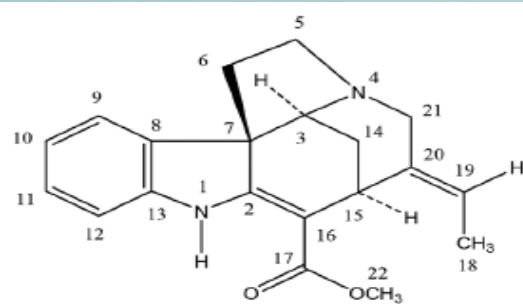
Semenov V.A., Samultsev D.O., Krivdin L.B. The  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts of *Strychnos* alkaloids revisited at the DFT level // *Magn. Reson. Chem.* – 2020. – V. 58. – P. 532–539.

**FIGURE 4** Mean absolute errors of calculated  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts of strychnines 1–10, as compared with experiment

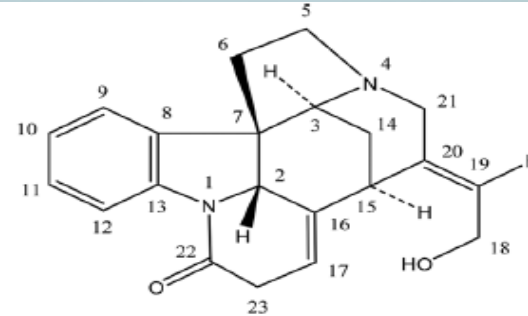


# Предсказание химических сдвигов стрихнина

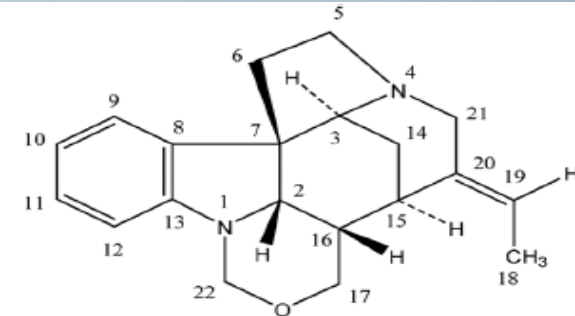
Semenov V.A., Samultsev D.O., Krivdin L.B.  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectra of Strychnos alkaloids: Selected NMR updates // *Int. J. Quant. Chem.* – 2020. – V. 120. – P. e26348



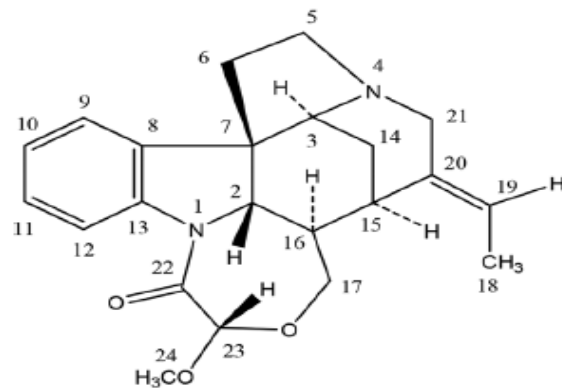
Akuammicine,  $\text{C}_{20}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_2$  (1)



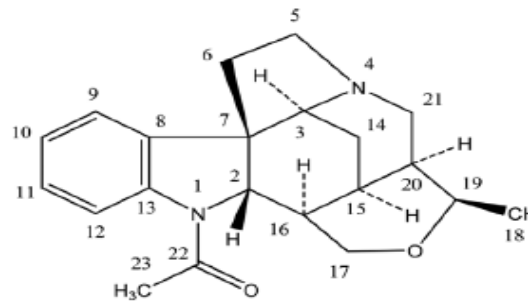
Isostrychnine,  $\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_2$  (2)



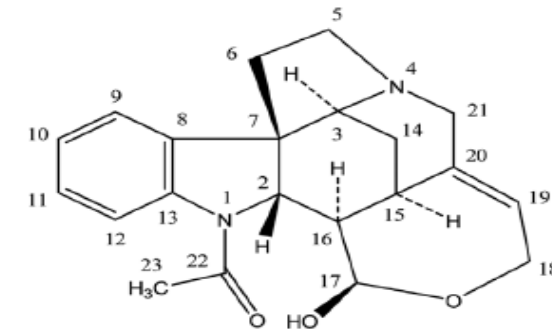
Rosibiline,  $\text{C}_{20}\text{H}_{24}\text{N}_2\text{O}$  (3)



Tsilanine,  $\text{C}_{22}\text{H}_{26}\text{N}_2\text{O}_3$  (4)



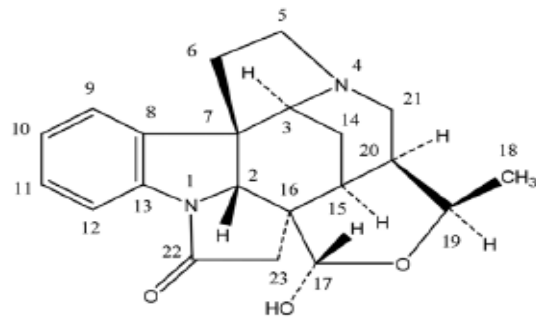
Spermostrychnine,  $\text{C}_{22}\text{H}_{28}\text{N}_2\text{O}_2$  (5)



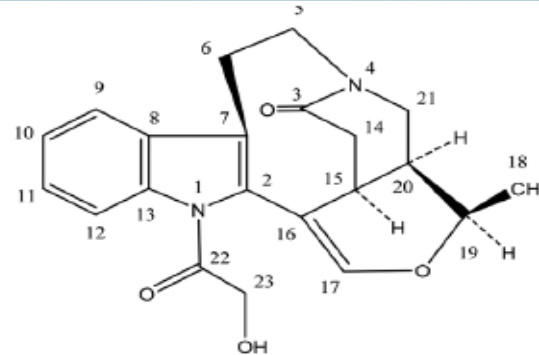
Diaboline,  $\text{C}_{21}\text{H}_{24}\text{N}_2\text{O}_3$  (6)

# Предсказание химических сдвигов стрихнина

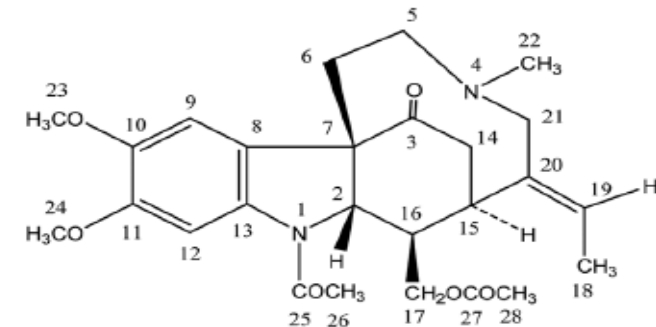
Semenov V.A., Samultsev D.O., Krivdin L.B. <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR spectra of Strychnos alkaloids: Selected NMR updates // Int. J. Quant. Chem. – 2020. – V. 120. – P. e26348



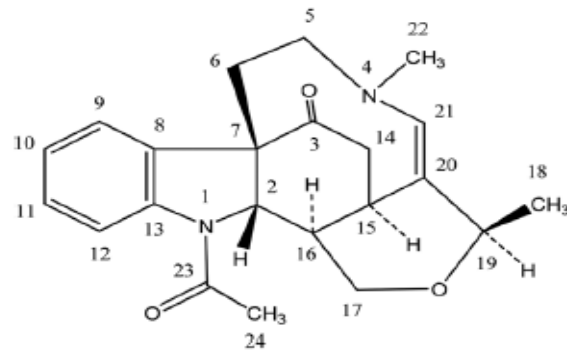
Cyclostrychnine, C<sub>21</sub>H<sub>24</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (7)



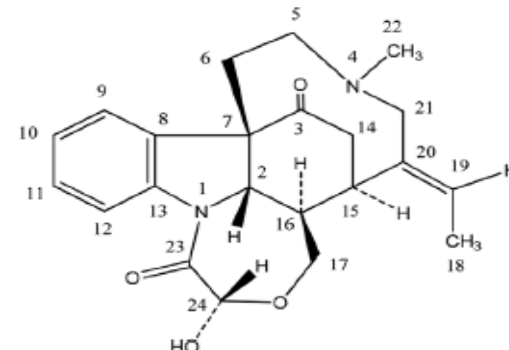
Henningsamide, C<sub>21</sub>H<sub>22</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (8)



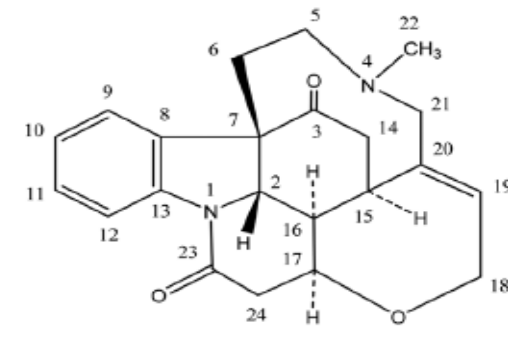
Strychnosilidine, C<sub>26</sub>H<sub>34</sub>N<sub>2</sub>O<sub>6</sub> (9)



Strychnobrasiline, C<sub>22</sub>H<sub>26</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (10)



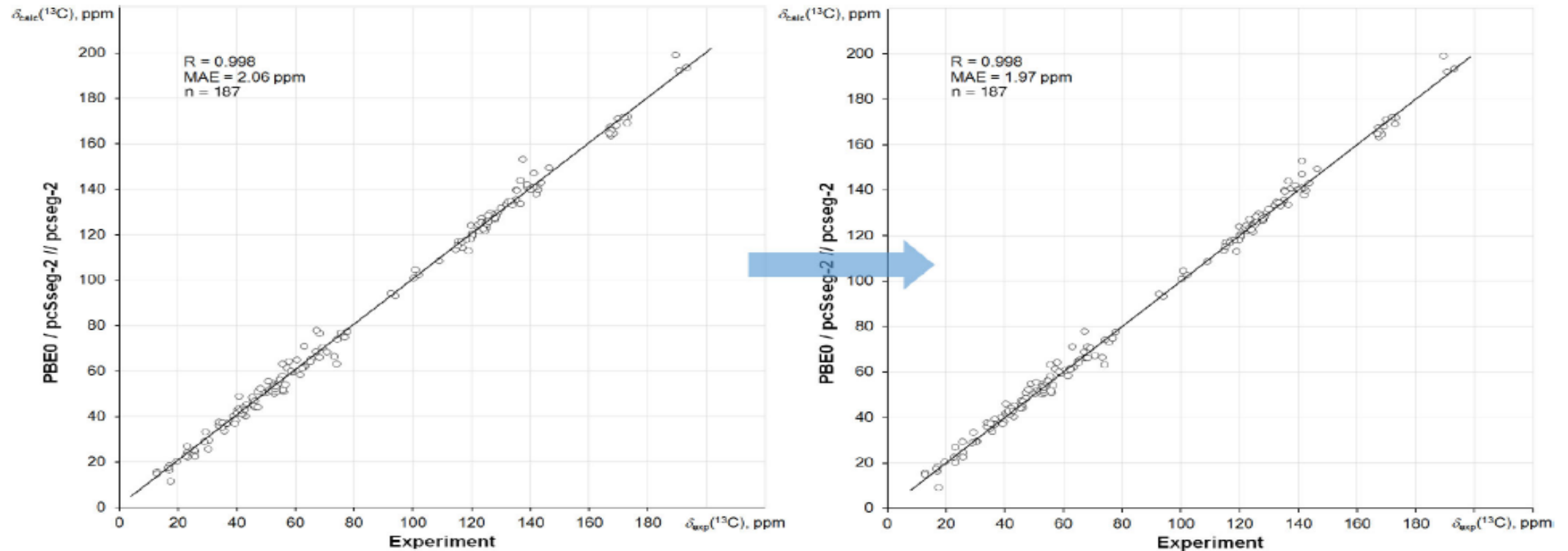
Holstiine, C<sub>22</sub>H<sub>26</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (11)



Icajine, C<sub>22</sub>H<sub>24</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (12)

## Предсказание химических сдвигов стрихнина

Semenov V.A., Samultsev D.O., Krivdin L.B.  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectra of Strychnos alkaloids: Selected NMR updates // *Int. J. Quant. Chem.* – 2020. – V. 120. – P. e26348.



**FIGURE 3** Correlation plots of the calculated  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts of strychnines 1–12 vs experiment: original (left) and reassigned (right). All calculations are performed by using the PBE0/pcSseg-2//pcseg-2 computational scheme

A GENUINELY MULTIDISCIPLINARY JOURNAL

# CHEMPLUSCHEM

CENTERING ON CHEMISTRY



1/2020

**Front Cover:**  
*N. M. Vitkovskaya and co-workers*  
 Base-Promoted Formation of an Annulated Pyrrolo-1,4-oxazine  
 Ensemble from 1*H*-pyrrol-2-ylmethanol and Propargyl Chloride:  
 A Theoretical and Experimental Study

WILEY-VCH

www.chempluschem.org



# JOC

The Journal of Organic Chemistry

JULY 17, 2020 VOLUME 85, NUMBER 14 pubscs.org/joc

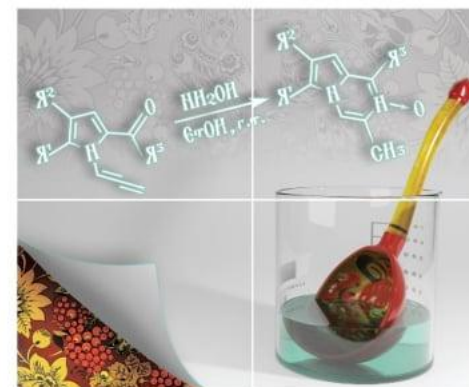


CELEBRATING 85 YEARS

ACS Publications  
 Most Trusted. Most Cited. Most Read.

www.acs.org

Volume 7 | Number 24 | 21 December 2020



## ORGANIC CHEMISTRY

FRONTIERS



CHINESE CHEMICAL SOCIETY



ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

rsc.li/frontiers-organic

**СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ,  
КОЛЛЕГИ!**

