



**Главный редактор**  
О. И. Койфман  
**Зам. главного редактора**  
П. А. Стужин

**Editor-in-Chief**  
Oscar I. Koifman  
**Deputy Editor**  
Pavel A. Stuzhin

**Международный редакционный совет**

В. Г. Ананд (Индия)  
О. Бекароғлы (Турция)  
Ф. А. Гейл (Великобритания)  
Э. И. Зенькевич (Беларусь)  
П. Зимчик (Чехия)  
Д. Вёрле (Германия)  
Н. Кобаяши (Япония)  
Л. Латос-Гражиньский (Польша)  
Д. Л. Сесслер (США)  
О. Г. Синяшин (Россия)  
Т. Торрес (Испания)  
Х. Фурута (Япония)  
А. Ю. Цивадзе (Россия)  
К. Д. Циглер (США)  
В. Н. Чарушин (Россия)  
О. Н. Чупахин (Россия)  
К. Эрколани (Италия)

**International Advisory Editorial Board**

V. G. Anand (India)  
Ö. Bekaroğlu (Turkey)  
P. A. Gale (Great Britain)  
E. I. Zenkevich (Belarus)  
P. Zimčík (Czech Republic)  
D. Wöhrle (Germany)  
N. Kobayashi (Japan)  
L. Latos-Grażyński (Poland)  
J. L. Sessler (USA)  
O. G. Sinyashin (Russia)  
T. Torres (Spain)  
H. Furuta (Japan)  
A. Yu. Tsivadze (Russia)  
C. J. Ziegler (USA)  
V. N. Charushin (Russia)  
O. N. Chupakhin (Russia)  
C. Ercolani (Italy)

Журнал является форумом специалистов, изучающих макрогетероциклические соединения. Он публикует оригинальные экспериментальные и теоретические работы (полные статьи и краткие сообщения) и обзоры по синтезу, строению, физической и координационной химии макрогетероциклов, а также их практическому применению.

The journal is a forum for the specialists investigating macroheterocyclic compounds. It publishes original experimental and theoretical works (full papers and short communications) and reviews on synthesis, structural characterization, physical and coordination chemistry as well as practical application of macroheterocycles.

**Abstract and indexing information:**

- ♦ CAS: Chemical Abstracts Service (ACS)
- ♦ Russian Index of Scientific Citation (РИНЦ)
- ♦ SCOPUS (Elsevier)

♦ Thomson Reuters Products:

- Current Contents®/Physical Chemical and Earth Sciences
- Science Citation Index Expanded (also known as SciSearch®)
- Journal Citation Reports/Science Edition

**Адрес редакции:**

Россия, 153000 Иваново,  
Пр. Шереметевский, 7  
Тел. +7 4932 327307  
э-почта: [macroheterocycles@isuct.ru](mailto:macroheterocycles@isuct.ru)  
<http://mhc-isuct.ru/>

**Редактор выпуска** – С. С. Иванова

**Верстка** – А. Л. Куленцан

**Дизайн обложки** – В. Б. Шейнин, П. А. Стужин

**Editorial address:**

Russia, RF-153000 Ivanovo,  
Sheremetevskiy pr., 7  
Tel. +7 4932 327307  
e-mail: [macroheterocycles@isuct.ru](mailto:macroheterocycles@isuct.ru)  
<http://mhc-isuct.ru/>

**Issue Editor** – S. S. Ivanova

**Computer make-up** – A. L. Kulenzan

**Cover design** – V. B. Sheinin, P. A. Stuzhin

**Учредитель:** ФГБОУ ВО «Ивановский государственный  
химико-технологический университет» (ИГХТУ)

**Publisher:** Ivanovo State University of Chemistry and Technology  
(ISUCT Publishing)

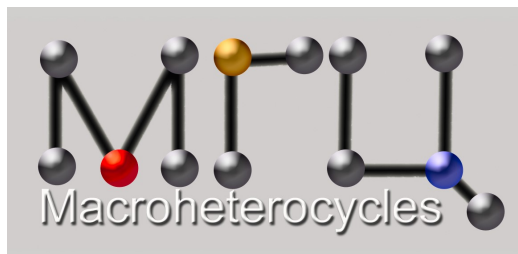
Периодичность – 4 выпуска в год

Published four times per year

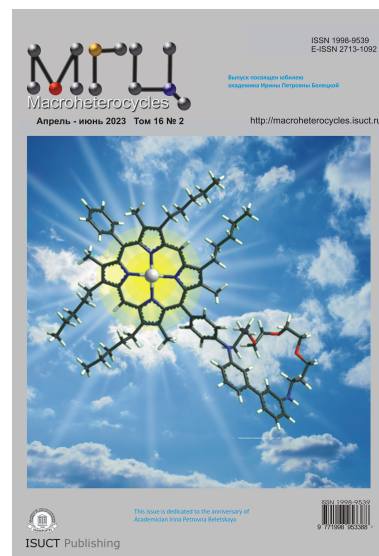
E-ISSN 2713-1092

Журнал зарегистрирован Роскомнадзором, свидетельство ЭЛ № ФС 77 - 84139 от 15.11.2022 г.

© 2023 ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»  
(ИГХТУ / ISUCT Publishing)



2023  
Том 16  
№ 2



Names in Science ♦ Имя в науке



This issue of the *Macroheterocycles* is dedicated to Academician I.P. Beletskaya.

**Irina P. Beletskaya. Biographical Sketch**

♦ 90 - 91

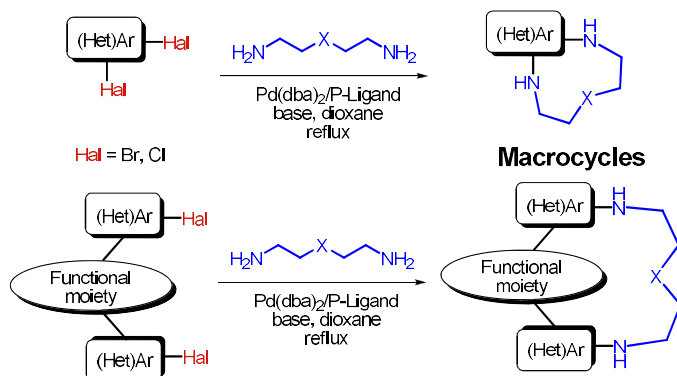
Этот выпуск журнала *Macroheterocycles* посвящен Академику РАН И.П. Белецкой.

**Ирина Петровна Белецкая.  
Биографический очерк**

Macrocycles ♦ Макроциклы

Microreview ♦ Миниобзор

Pd(0)-catalyzed amination was shown to be a versatile tool for the synthesis of *N*- and *O*-containing macrocyclic and polymacrocyclic compounds. The reactions employed various (hetero)aryl dihalides, linear oxadiazines and polyamines, aza- and diazacrown ethers as well as tri- and tetraazamacrocycles.



Продemonстрировано, что Pd(0)-катализируемое аминирование является универсальным подходом для синтеза *N*- и *O*-содержащих макроциклов и полимакроциклов. Реакции проходят с участием (гетеро)арил-дигалогенидов, линейных оксадиаминов, полиаминов, различных азакаун-эфиров.

*A. D. Averin, A. S. Abel, A. S. Malysheva, N. M. Chernichenko, A. A. Yakushev*  
**Palladium-Catalyzed Amination for the Synthesis of Macrocycles and Polymacrocycles: Contribution of Professor I.P. Beletskaya**

♦ 92 - 108

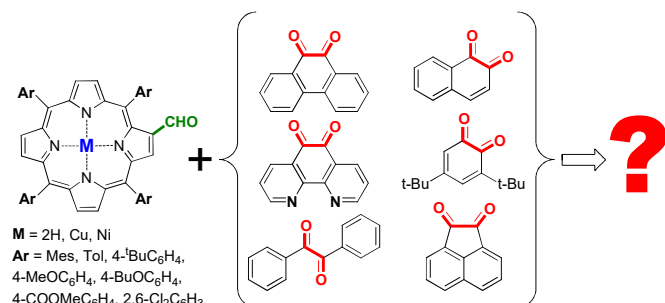
*А. Д. Аверин, А. С. Абель, А. С. Мальшиева, Н. М. Черниченко, А. А. Якушев*

**Палладий-катализируемое аминирование в синтезе макроциклов и полимакроциклов: вклад профессора И.П. Белецкой**

Porphyrins ♦ Порфирины

Paper ♦ Статья

The scope of the Debus-Radziszewski condensation of 2-formylporphyrins and aromatic  $\alpha$ -diketones for the preparation of functionalized derivatives is investigated with the application of representative sets of starting materials. In most cases moderate to nearly quantitative yields of the target products were obtained.



Изучена применимость конденсации 2-формилпорфиринов и ароматических  $\alpha$ -дикетонов в условиях реакции Дебуса-Радзишевского для получения функционализированных производных. Конденсация приводит к целевым соединениям с выходами от умеренных до практически количественных.

*D. A. Polivanovskaia, E. S. Shremzer, T. V. Voronova, K. P. Birin, Yu. G. Gorbunova, A. Yu. Tsivadze*  
**Efficient Approach to Functionalized  $\beta$ -Imidazolypporphyrins**

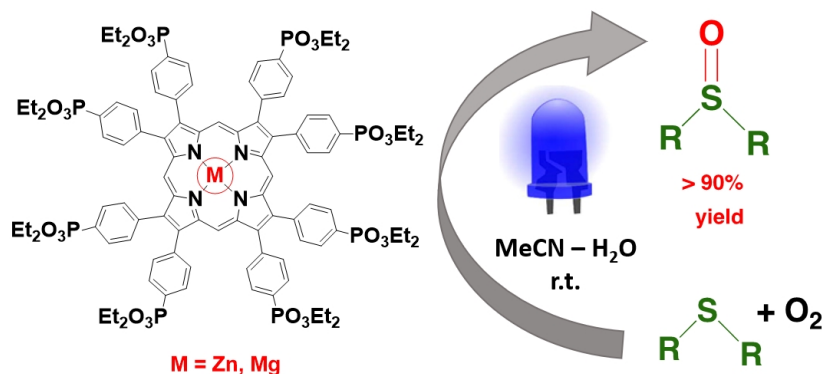
♦ 109 - 116

*Д. А. Поливановская, Е. С. Шремзер, Т. В. Воронова, К. П. Бирин, Ю. Г. Горбунова, А.Ю. Цивадзе*  
**Эффективный подход к получению  $\beta$ -имидазолипорфиринов**

Porphyrins ♦ Порфирины

Paper ♦ Статья

Mg and Zn complexes with phosphonate-substituted  $\beta$ -octaphenylporphyrins are efficient photocatalysts for oxidation of sulfides to sulfoxides by molecular oxygen.



Фосфонатзамещенные  $\beta$ -октафенилпорфиринаты магния и цинка эффективны в фотоокисления сульфидов в сульфоксиды молекулярным кислородом.

*E. V. Ermakova, A. Bessmertnykh-Lemeune*  
**Mg and Zn Complexes with Phosphonate-Substituted  $\beta$ -Octaphenylporphyrin as Photocatalysts for Oxidation of Sulfides**

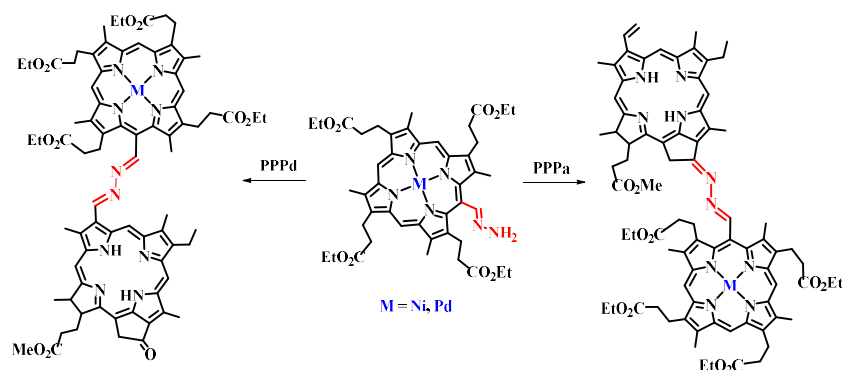
♦ 117 - 122

*Е. В. Ермакова, А. Бессмертных-Лемен*  
**Фосфонатзамещенные  $\beta$ -октафенилпорфиринаты Mg и Zn как фотокатализаторы для окисления сульфидов**

Porphyrins ♦ Порфирины

Paper ♦ Статья

Asymmetrical dyads with azine bridge were obtained from  $Ni^{II}$  and  $Pd^{II}$  coproporphyrin I and pyropheophorbides *a* and *d*.



Несимметричные диады с азиновым мостиком были получены из комплексов копропорфирина I с  $Ni^{II}$  и  $Pd^{II}$  и пиропфеофорбидами *a* и *d*.

*A. O. Shkirdova, V. S. Tyurin, I. A. Zamiatkov*  
**Dyades of Coproporphyrin I with Pyropheophorbides Bound by Azine bridge**

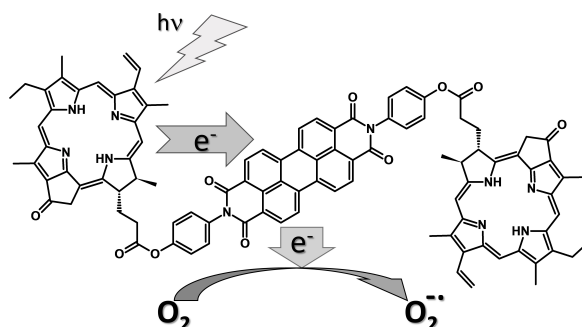
♦ 123 - 130

*А. О. Шкирдова, В. С. Тюрин, И. А. Замилацков*  
**Диады копропорфирина I с пиропфеофорбидами, связанные азиновым мостиком**

Porphyrins ♦ Порфирины

Paper ♦ Статья

The obtained PP-PDI-PP triad showed a three-fold increase of the superoxide anion-radical generation efficiency under red light irradiation, which shows the promising potential of such perylene-dye structures as type I photosensitizers for PDT.



Полученная триада PP-PDI-PP показала трехкратное увеличение эффективности генерации супероксидного анион-радикала при облучении красным светом, что свидетельствует о перспективности структур перилена-краситель в качестве фотосенсибилизаторов I типа для ФДТ.

*A. V. Kozlov, L. R. Sizov, A. Yu. Rybkin, O. I. Istakova, D. V. Konev, E. A. Khakina, M. O. Koifman, N. S. Goryachev*  
**Photophysical and Photochemical Properties of the Pyropheophorbide-Perylene-Pyropheophorbide Triad**

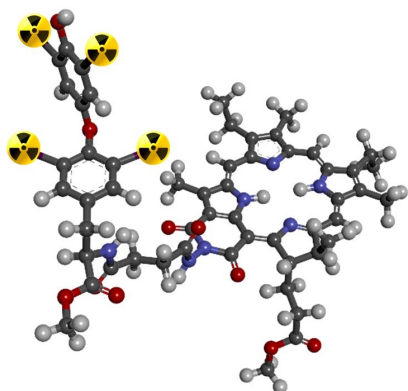
♦ 131 - 136

*A. B. Козлов, Л. Р. Сизов, А. Ю. Рыбкин, О. И. Истакова, Д. В. Конев, Е. А. Хакина, М. О. Койфман, Н.С. Горячев.*  
**Фотофизические и фотохимические свойства триады пиррофеофорбид-перилена-пиррофеофорбид**

Porphyrins ♦ Порфирины

Paper ♦ Статья

In this study, we implemented the methods for incorporating an iodine atom into the photosensitizer structure that involve addition of an iodine-containing organic molecules to a natural chlorin as well as direct iodination of the pigment derivatives.



В работе реализовано введение атома иода в структуру фотосенсибилизатора, включающее присоединение к природному хлорину иодсодержащих органических молекул, а также прямое иодирование производных пигмента.

*D. A. Minakov, N. V. Suvorov, S. I. Tikhonov, E. A. Plotnikova, A. D. Plyutinskaya, M. A. Grin*  
**Development of Iodine-containing Natural Chlorins as Prototypes of Radiopharmaceuticals with Iodine Radionuclides**

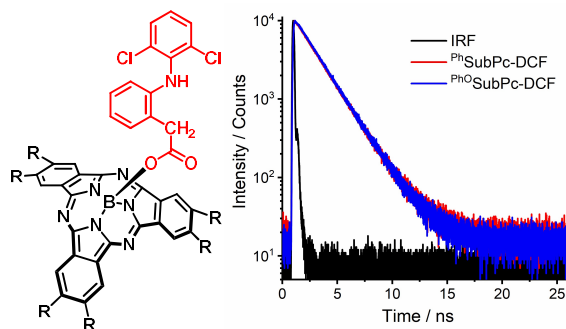
♦ 137 - 143

*Д. А. Минаков, Н. В. Суворов, С. И. Тихонов, Е. А. Плотникова, А. Д. Плютинская, М. А. Грин*  
**Разработка иодсодержащих природных хлоринов в качестве прототипов радиофармпрепаратов с радионуклидами иода**

Phthalocyanines ♦ Фталоцианины

Paper ♦ Статья

Phenyl and phenoxy-substituted boron subphthalocyanines were decorated by non-steroidal anti-inflammatory drug diclofenac using axial exchange reaction. Target compounds demonstrate good yields of singlet oxygen generation and high fluorescence quantum yields more pronounced by diclofenac introduction.



Нестероидный противовоспалительный препарат диклофенак был введен в молекулы фенил- и феноксизамещенных субфталоцианинов бора. Соединения демонстрируют высокие выходы генерации синглетного кислорода и квантовые выходы флуоресценции, а также влияние диклофенака на выходы флуоресценции.

*T. V. Dubinina, I. D. Burtsev, A. S. Agranat, A. E. Egorov, A. A. Kostyukov, V. A. Kuzmin, E. R. Milaeva*  
**Boron Subphthalocyanines Bearing Non-Steroidal Anti-Inflammatory Drug Diclofenac: Synthesis and Photochemical Properties**

♦ 144 - 149

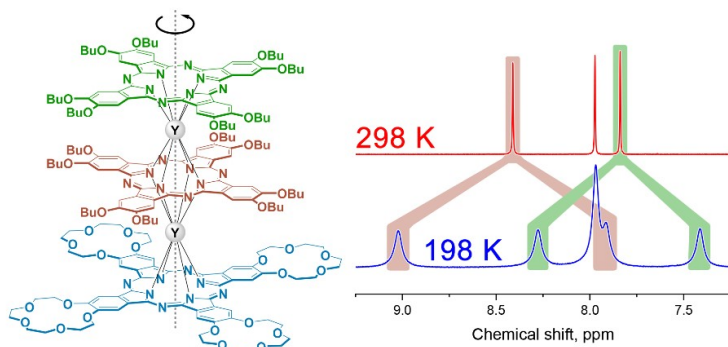
*Т. В. Дубинина, И. Д. Бурцев, А. С. Агранат, А. Е. Егоров, А. А. Костюков, В. А. Кузьмин, Е. Р. Милаева*  
**Субфталоцианины бора, содержащие нестероидный противовоспалительный препарат диклофенак: синтез и фотохимические свойства**



Phthalocyanines ♦ Фталоцианины

Paper ♦ Статья

The conformational dynamics of yttrium(III) trisphthalocyaninates has been studied by variable temperature NMR in order to find the thermodynamic and kinetic characteristics of the intramolecular rotation of the phthalocyanine ligands.



Конформационная динамика трисфталоцианинатов иттрия(III) была изучена методом ЯМР при переменной температуре для определения термодинамических и кинетических характеристик внутримолекулярного вращения фталоцианиновых лигандов.

*A. G. Martynov, G. A. Kirakosyan*  
**Characterizing the Conformational Behavior of Yttrium(III) Tris-Phthalocyaninates Using Variable Temperature NMR Spectroscopy**

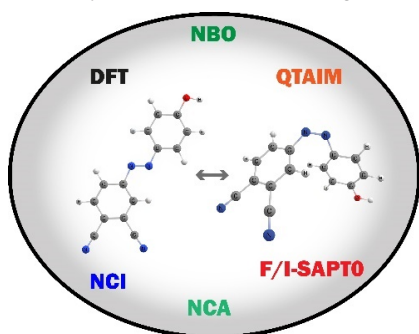
♦ 150 - 155

*А. Г. Мартынов, Г. А. Киракосян*  
**Исследование конформационного поведения трисфталоцианинатов иттрия(III) с использованием спектроскопии ЯМР при переменной температуре**

Phthalocyanines ♦ Фталоцианины

Paper ♦ Статья

Structural features, conformational manifold and isomeric forms of *p*-HPhAPN were studied by B3LYP calculations using QTAIM, NPA, NBO, NCI analysis. Assignment of vibrational modes was carried out via potential energy distribution analysis among internal coordinates.



С помощью B3LYP расчетов изучены структурные особенности строения, конформационное многообразие и изомерия *p*-HPhAPN. Проведено описание колебаний *p*-HPhAPN на основе анализа РПЭ форм нормальных колебаний по естественным колебательным координатам.

*A. E. Pogonin, I. Yu. Kurochkin, A. S. Malyasova, K. V. Ksenofontova, O. I. Koifman*  
**Molecular Structure and Vibrational Spectra of 4-(4-Hydroxyphenylazo)-phthalonitrile: DFT Study**

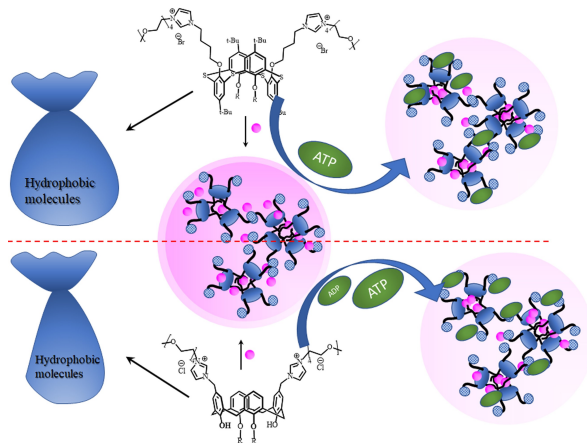
♦ 156 - 167

*А. Е. Погонин, И. Ю. Курочкин, А. С. Малясова, К. В. Ксенофонтова, О. И. Койфман*  
**Молекулярная структура и колебательные спектры 4-(4-гидроксифенилазо)фталонитрила: DFT изучение**

Calixarenes ♦ Каликсарены

Paper ♦ Статья

The dependence of the type macrocycles with effective solubilization capacity, interaction with dianion dye and sensitivity of recognition of binary system macrocycle-eosin Y on adenosine phosphates (mono, di or triphosphate) are shown.



Показана различная солюбилизирующая способность, взаимодействие с дианионным красителем и селективность двойной системы макроцикл – краситель по отношению к аденозинфосфатам.

*E. D. Sultanova, B. Kh. Gafiatullin, E. A. Ocherednyuk, R. I. Garipova, A. A. Volodina, A. G. Daminova, V. G. Evtugyn, V. A. Burilov, S. E. Solovieva, I. S. Antipin*  
**N-Oxyethylimidazolium Calix[4]arenes and Thiacalix[4]arenes: Difference in Solubilization Property and Detection of Adenine-Containing Nucleotides**

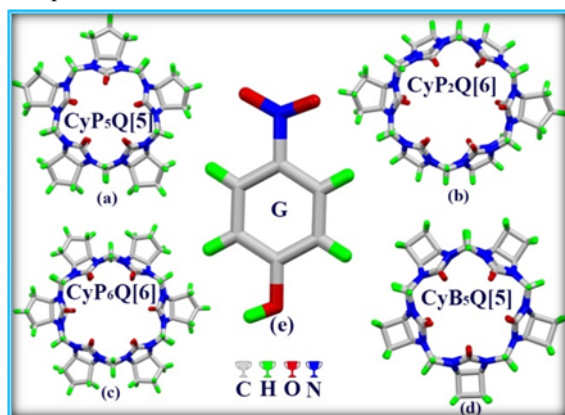
♦ 168 - 176

*Э. Д. Султанова, Б. Х. Гафиатуллин, Е. А. Очереднюк, Р. И. Гарипова, А. А. Володина, А. Г. Даминова, В. Г. Евтюгин, В. А. Бурilов, С. Е. Соловьева, И. С. Антипин*  
**N-Олигоэтиленгликоль-имидазолиевые производные тиакаликс[4]арена и каликс[4]арена: различие в солюбилизирующих свойствах и обнаружение аденозинфосфатов**

N-Macrocycles ♦ N-Макроциклы

Paper ♦ Статья

We report the supramolecular self-assembly of  $\text{CyP}_5\text{Q}[5]$ ,  $\text{CyP}_6\text{Q}[6]$ ,  $\text{CyP}_2\text{Q}[6]$  and ( $\text{CyB}_5\text{Q}[5]$ ). In these four systems, calcium ions were introduced to coordinate with the cucurbit[*n*]uril, and *p*-nitrophenol was enriched on the outer surface of the cucurbit[*n*]uril to construct four supramolecular frameworks.



Сообщается о супрамолекулярной самосборке  $\text{CyP}_5\text{Q}[5]$ ,  $\text{CyP}_6\text{Q}[6]$ ,  $\text{CyP}_2\text{Q}[6]$  и ( $\text{CyB}_5\text{Q}[5]$ ). В этих четырех системах ионы кальция были введены для координации с кукурбит[*n*]урилом, а *p*-нитрофенол был дополнен на внешнюю поверхность кукурбит[*n*]урила для построения четырех супрамолекулярных каркасов.

*Jun Zheng, Jiakang He, Linwei Yuan, Peihua Ma*

**Construction of Supramolecular Self-Assembled Frameworks Comprised of *P*-Nitrophenol and Four Modified Cucurbit[*n*]urils**

♦ 177 - 185

*Джун Чжэн, Джаакан Хе, Линвэй Юань, Пэйхуа Ма*

**Конструирование супрамолекулярных самособирающихся каркасов, состоящих из *p*-нитрофенола и четырех модифицированных кукурбит[*n*]урилов**