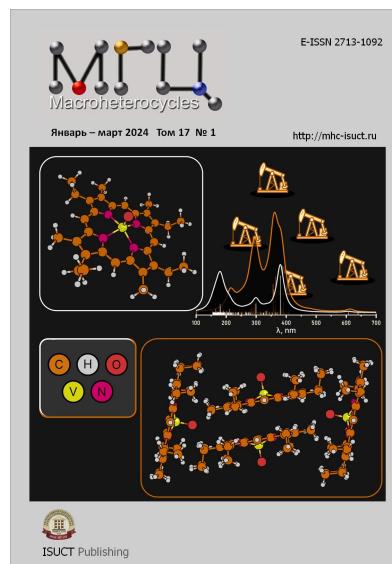
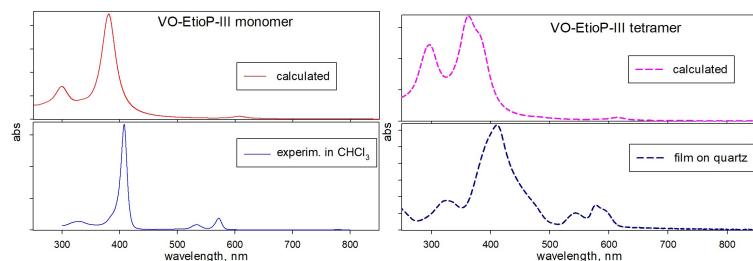


2024  
Том 17  
№ 1



Porphyrins ♦ Порфирины

The quantum chemical calculations of electronic structure of vanadyl etioporphyrin-III VO-EtiP-III as a single molecule and as a tetramer, geometry of which coincides with the unit cell, were used to assess the relationship between crystal packing and absorption spectra.



Для оценки влияния кристаллической упаковки на спектры поглощения были использованы квантово-химические расчеты электронной структуры молекулы комплекса этиопорфирина-III с ванадилом VO-EtiP-III и его тетрамера, соответствующего геометрии элементарной ячейки.

Paper ♦ Статья

Y. A. Zhabanov, A. V. Eroshin,  
O. I. Koifman, V. V. Travkin,  
G. L. Pakhomov

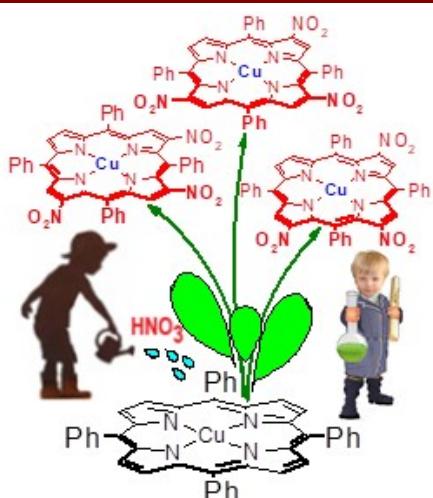
**Monomeric and Tetrameric Forms of Petroporphyrin VO-EtiP-III: Effect of Solid-State Aggregation on Electronic Absorption Spectra**

♦ 4 - 8

Ю. А. Жабанов, А. В. Ерошин,  
О. И. Коифман, В. В. Травкин,  
Г. Л. Пахомов

**Мономерная и тетрамерная форма петропорфирина VO-EtiP-III:  
влияние агрегации в твердой фазе на  
электронные спектры поглощения**

Porphyrins ♦ Порфирины



The preparation, chromatographic isolation, and structure elucidation of β,β,β-substituted isomers of trinitro-5,10,15,20-tetraphenylporphyrin complexes are described. These types of products are attractive starting materials for synthesis of potential anticancer PDT agents.

Определена структура β,β,β-замещенных изомеров тринитро-5,10,15,20-тетрафенилпорфириновых комплексов. Полученные соединения являются ценным исходным материалом для синтеза перспективных противораковых агентов ФДТ.

Paper ♦ Статья

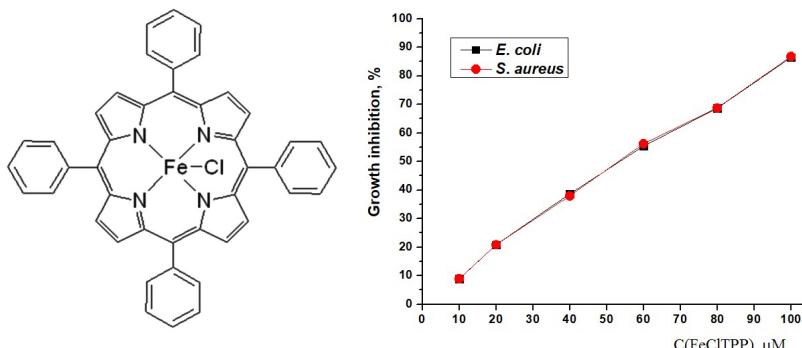
S. Ostrysz, A. Mikus, S. Ostrowski  
**Synthesis and Structure Elucidation of β,β,β-Trinitro-meso-tetraphenylporphyrin Derivatives**

♦ 9 - 15

С. Острыш, А. Мікус, С. Островський  
**Синтез і определение структуры производных β,β,β-тринитро-мезо-тетрафенилпорфирина**

**Porphyrins ♦ Порфирины**

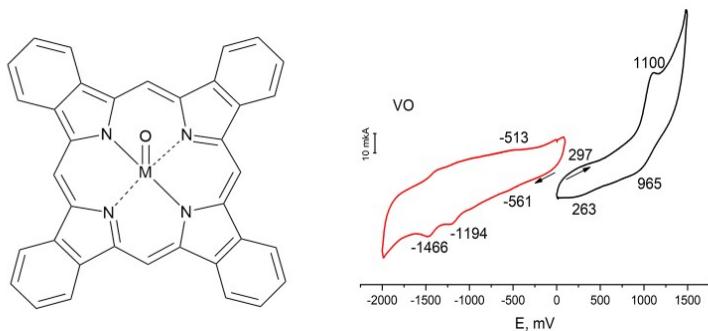
The data on the antibacterial activity study of  $\text{Fe}^{\text{III}}\text{Cl}$ -tetraphenylporphyrin incorporated into poly-*N*-vinylpyrrolidone polymeric matrix against antibiotic-resistant gram-negative and gram-positive microorganisms - *Escherichia coli* and *Staphylococcus aureus* are presented.



Представлены данные изучения антибактериальной активности  $\text{Fe}^{\text{III}}\text{Cl}$ -тетрафенилпорфирина в составе полимерной матрицы поли-*N*-винилпирролидона в отношении антибиотикорезистентных грамотрицательных и грамположительных микроорганизмов – *Escherichia coli* и *Staphylococcus aureus*.

**Porphyrins ♦ Порфирины**

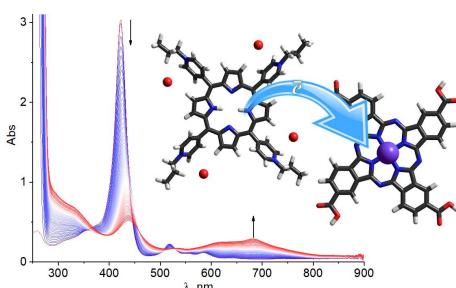
Complexes of tetrabenzoporphyrin (TBP) with vanadyl and titanyl were prepared and studied using spectral and electrochemical methods. Their molecular and electronic structure was investigated by DFT calculations.



Синтезированы комплексы тетрабензопорфирина с ванадилом и титанилом, изучены их спектральные и электрохимические свойства. Молекулярное и электронное строение исследовано методом DFT.

**Porphyrins ♦ Порфирины**

A heterocomplex based on cationic porphyrin and anionic cobalt phthalocyaninate has been obtained. The donor-acceptor character of interaction between differently charged macroheterocycles has been confirmed.



Получен гетерокомплекс на основе катионного порфирина и анионного фталоцианината кобальта. Подтвержден донорно-акцепторный характер взаимодействия разно-зарядных макрогетероциклов между собой.

**Paper ♦ Статья**

*D. V. Gruznov, O. A. Gruznova, N. I. Popov, Z. E. Alieva, G. Sh. Shcherbakova, E. V. Kitushina, E. N. Ovcharenko, E. G. Gololobova, I. V. Klimenko, A. V. Lobanov, M. Ya. Melnikov*

**Antibacterial *in vitro* Studies of  $\text{Fe}^{\text{III}}\text{Cl}$ -Tetraphenylporphyrin Incorporated into Poly-*N*-vinylpyrrolidone Polymeric Matrix**

◆ 16 - 21

*Д. В. Грунов, О. А. Грунова, Н. И. Попов, З. Е. Алиева, Г. Ш. Щербакова, Е. В. Китушина, Е. Н. Овчаренко, Е. Г. Гололобова, И. В. Клименко, А. В. Лобанов, М. Я. Мельников*

**Антибактериальные исследования *in vitro*  $\text{Fe}^{\text{III}}\text{Cl}$ -тетрафенилпорфирина, включенного в полимерную матрицу поли-*N*-винилпирролидона**

**Paper ♦ Статья**

*D. N. Finogenov, A. I. Koptyaev, A. V. Eroshin, A. S. Kopylova, A. A. Nabasov, N. E. Galanin, Y. A. Zhabanov, P. A. Stuzhin*

**Molecular and Electronic Structure, and Electrochemical Study of Oxometal(IV) Tetrabenzoporphyrins, [T BPM] (M = VO, TiO)**

◆ 22 - 28

*Д. Н. Финогенов, А. И. Коптяев, А. В. Ерошин, А. С. Копылова, А. А. Набасов, Н. Е. Галанин, Ю. А. Жабанов, П. А. Стужин*

**Молекулярное и электронное строение и электрохимическое исследование тетрабензопорфиринато(оксо)металлатов(IV), [T BPM] (M = VO, TiO)**

**Communication ♦ Сообщение**

*V. A. Kulev, N. L. Pechnikova, A. V. Lyubimtsev, T. A. Ageeva*

**Interaction of Cationic Porphyrin with Cobalt Tetracarboxyphthalocyaninate in a Solution**

◆ 29 - 33

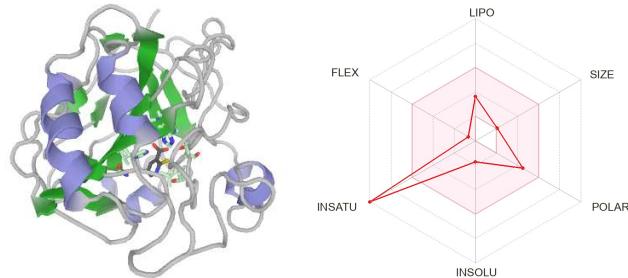
*В. А. Кулев, Н. Л. Печникова, А. В. Любимцев, Т. А. Агеева*

**Взаимодействие катионного порфирина с тетракарбоксифталоцианинатом кобальта в растворе**

Cyclodextrins ◆ Циклодекстрины

Paper ◆ Статья

Cu(II) complexes with mono-6-O-nicotinoyl- and mono-6-S-mercaptoponicotinoyl- $\beta$ -cyclodextrins were synthesized. Possible protein targets were predicted by the protein-ligand docking method. An analysis of antibacterial activity *in vitro* was carried out.



Синтезированы комплексы Cu(II) с моно-6-O-никотиноил- $\beta$ - и моно-6-S-меркаптоникотиноил- $\beta$ -циклодекстринами. Методом протеин-лигандного докинга спрогнозированы возможные белковые мишени. Проведен *in vitro* анализ антибактериальной активности.

*M. V. Papezhuk, V. A. Volynkin,  
S. N. Bolotin, V. T. Panyushkin  
Synthesis  $\beta$ -Cyclodextrin Nicotinate and  
Mercaptonicotinate and Their Complex  
Formation with Cu(II)*

◆ 34 - 44

Name in Science ◆ Имя в науке

Paper ◆ Статья



In memory of Oscar I. Koifman, editor-in-chief of the *Macroheterocycles*, on whose initiative our journal was created and has successfully developed over 15 years.

31 декабря 2023 г. ушел из жизни главный редактор журнала *Макрогетероциклы* Оскар Иосифович Койфман, по инициативе которого был создан наш журнал и успешно развивался в течение 15 лет.

**In Memory of Oscar I. Koifman**

◆ 45 - 46

**Памяти Оскара Иосифовича Койфмана**