

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U001261

Державний реєстраційний номер: 0115U003537

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-01-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Дослідження перетворень нових стабільних карбенів з метою отримання біологічно активних сполук

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 5596675, 5596686

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут органічної хімії
НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон:

Внесок співвиконавця у звітний етап:

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук
України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 – договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 – фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 – кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2528.57
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Стабільні карбени нового покоління та їх похідні. Синтез і властивості

Назва роботи англійською:

Stable carbenes of a new generation. Synthesis and properties

Реферат українською:

Розроблено синтез стабільних карбенів та їх прекарбенових форм, а також карбенових комплексів перехідних металів (паладію та міді(I)) на основі 1,3-димезитил-фенантро[9,10-d]імідазол-2-ілідену, 1,3-ді(1-адамантил)-5,6-дигідро-4Н-піримідин-2-ілідену, 1,3-ді(1-адамантил)-4,5-дигідроімідазол-2-ілідену, розгалужених 2,4,6-тризаміщених ароматичних похідних імідазол-2-іліденів. Доведено високий каталітичний ефект (TON до 1000) карбенових комплексів ціаніду міді(I) в реакціях ціандегалогенування галоаренів ціанідом натрію або триметилсилілціанідом. Показано, що комплекси розгалужених 2,4,6-тризаміщених ароматичних похідних імідазол-2-іліденів ефективно каталізують реакцію гідродегалогенування галоаренів під дією метоксиду натрію в ізопропанолі (TON до 110000 на прикладі реакції п-дихлорбензену). Методом DFT проведено розрахунки енергій димеризації великої кількості карбенів та визначено найстабільніші системи. Отримані дані мають значення для розвитку препаративного синтезу стабільних карбенів та їх прекурсорів, каталізу реакцій відновлення кратних зв'язків та галогенаренів, функціоналізації органічних сполук. Галузь застосування – синтез стабільних карбенів та їх прекурсорів, каталіз реакції гідродегалогенування та ціанодегалогенування галоаренів.

Реферат англійською:

The synthesis of stable carbenes and their precalibenic forms, as well as carbene complexes of transition metals (palladium and copper (I)) on the basis of 1,3-dimesitylphenantro[9,10-d]imidazol-2-ylidene, 1,3-di(1-adamantyl) - 5,6-dihydro-4H-pyrimidin-2-ylidene, 1,3-di(1-adamantyl)-4,5-dihydroimidazol-2-ylidene, branched 2,4,6-trisubstituted aromatic derivatives of imidazol-2-ylidenes. The high catalytic effect (TON up to 1000) of copper cyanide carbene complexes (I) was proved in the reactions of cyanodehalogenation of haloarenes with sodium cyanide or trimethylsilylcyanide. It has been shown that the complexes of branched 2,4,6-trisubstituted aromatic derivatives of imidazol-2-ylidenes effectively catalyze the reaction of hydrohalogenation of haloarenes under the action of sodium methoxide in isopropanol (TON up to 110,000 on the instance of the reaction of p-dichlorobenzene). The energy of dimerization of a large number of carbenes were calculated by DFT method that identified the most stable systems. The obtained data are important for the development of the preparative synthesis of stable carbenes and their precursors, catalysis of the reduction reactions of multiple bonds and haloarenes, and the functionalization of organic compounds. Area of application - synthesis of stable carbenes and their precursors, catalysis of the reaction of hydrodehalogenation of haloarenes and other reactions.

Індекс УДК: 547, 547.78+547.79

Коди тематичних рубрик: 31.21.01

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Короткіх Микола Іванович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Методи синтезу нових типів карбенів на основі імідазол-2-іліденів, конденсованих аналогів, діамінокарбенів та їх комплексів з перехідними металами

Назва НТП англійською: Methods for the synthesis of new types of carbenes on the basis of imidazol-2-ylidenes, their fused analogues, diaminocarbenes and their complexes with transition metals

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 - Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено синтез стабільних карбенів та їх прекарбенових форм, карбенових комплексів перехідних металів (паладію та міді(І)) на основі 1,3-димезитилфенантро[9,10-d]імідазол-2-ілідену, 1,3-ді(1-адамантил)-5,6-дигідро-4Н-піримідин-2-ілідену, 1,3-ді(1-адамантил)-4,5-дигідроімідазол-2-ілідену, розгалужених 2,4,6-тризаміщених ароматичних похідних імідазол-2-іліденів. Доведено високий каталітичний ефект (TON до 1000) карбенових комплексів ціаніду міді(І) в реакціях ціанодегалогенування галоаренів під дією ціаніду натрію або триметилсилілціаніду.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Не визначалися

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Підприємства міністерства надзвичайних ситуацій, фармацевтичні та хімічні підприємства.

Перспективні ринки: Не визначалися

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): Не визначався

Додаткова інформація: Не визначалися

IX. Бібліографічний опис

1. Sterically Shielded Stable Carbenes and Biscarbenes of the 1,2,4-Triazole Series. A New Method for the Preparation of 1,3,4-Triaryl-1,2,4-triazol-5-ylidenes / N.V. Glinyanaya, N.I. Korotkikh, A.H. Cowley, O. Williams, R.A. Jones, V. M. Lynch, A.V. Kiselyov, G. F. Rayenko, M.A. Derevenets, A.B. Ryabitsky, O. Esarte Palomero, O.P. Shvaika // Chemistry Select. 2018. № 3. P. 5244–5248. 2. Протонна спорідненість ряду гетероциклічних карбенів та їх йонних форм / М.І.Короткіх, Г.Ф. Раєнко, В.Ш. Саберов, А.Ф. Попов, О.П.Швайка // Укр. хім. журн. 2018. 84, № 9. P. 34–41.

Х. Заключение відомості

Керівник юридичної особи

Попов Анатолій Федорович

д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Єня Василь Іванович

Гресько Сергій Володимирович

Дзюба Оксана Іванівна

Ковач Микола Анатолійович

Короткіх Владислав Миколайович

Короткіх Микола Іванович

Літвінов Юрій Євгенович

Монастирна Євгенія Олександрівна

Нечитайлов Максим Михайлович

Раєнко Геннадій Федорович

Скоробогатова Зоя Михайлівна

Ткачук Юлія Валентинівна

Устілко Юлія Володимирівна

Устілко Юлія Олександрівна

Швайка Олесь Павлович

Відповідальний за підготовку

облікових документів

Телефон

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

