Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100346

Державний реєстраційний номер: 0118U003393

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Синтез похідних бензоазакраун-етерів, які містять на атомах Нітрогену бензильні, оксіетильні, етерні, естерні і карбоксильні групи. Дослідження комплексоутворюючої здатності отриманих краун-етерів відносно катіонів s-елементів. Встановлення залежності між комплексоутворюючими властивостями синтезованих похідних каліксарену, а саме - стійкістю та стехіометрією комплексів, від природи та кількості гетероциклічних замісників у складі молекули макроциклу.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

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:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442350981

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 757.951

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез та властивості нових потенційних комплексонів катіонів s- та d-елементів на основі похідних аза(бензоаза)краун-етерів та калікс[4]аренів із замісниками, до складу яких входять гетероциклічні та ароматичні фрагменти

Назва роботи англійською:

Synthesis and properties of new potential complexons of cations of s and d elements based on aza(benzoaza)crown ethers derivatives and calix[4]arenes with substituents that include heterocyclic and aromatic fragments

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – синтез, структура та комплексоутворюючі властивості N-заміщених похідних бензоаза-15-краун-5. Синтез, комплексоутворюючи та екстракційні властивості п-трет-бутилкалікс[4]аренів у різному ступені заміщення по нижньому вінцю, до складу замісників яких входять гетероциклічні системи імідазолу. Мета роботы – синтез похідних бензоаза-15-краун-5, які містять на атомах Нітрогену бензильні, оксіетильні, етерні, естерні і карбоксильні групи. Дослідження комплексоутворюючої здатності отриманих краун-етерів відносно катіонів s-елементів. Встановлення залежності між комплексоутворюючими та екстракційними властивостями синтезованих похідних каліксарену відносно катіонів деяких металів s-, d-елементів від природи та кількості гетероциклічних замісників у складі молекули макроциклу. Отримані похідні бензоаза-15-краун-5, які містять на атомах Нітрогену бензильні, оксіетильні, етерні, естерні і карбоксильні групи. Методом спектрофотометричного титрування визначено константи стійкості комплексів похідних бензоаза-15-краун-5 з катіонами лужних і лужноземельних металів. Виявлено, що для заміщених бензоаза-15-краун-5, що містять етерні атоми Оксигену в бічному ланцюзі, при взаємодії з катіонами лужних і лужноземельних металів спостерігається збільшення констант стійкості комплексів, які утворюються, за рахунок ларіатного ефекту. Однак, практично не спостерігається утворення комплексів складу 2:1 (ліганд-метал) навіть для іонів великого розміру. Отримані нові моно- і дизаміщені по нижньому ободу п-трет-бутилкалікс[4]арени з фрагментами імідазолів, які приєднані за допомогою різних лінкерів. Екстракційним методом показано, що всі імідазолутримуючи каліксарени виявляють здатність до виділення катіонів лужних, лужноземельних та перехідних металів. Більшу ефективність відносно катіонів перехідних металів демонструють каліксарени із амідною групою у замісника. Для монозаміщених сполук характерна здатність до ефективного зв'язування катіонів s-елементів, вірогідно за раху

Реферат англійською:

The object of research - synthesis, structure and complexing abilities of N-substituted benzoazacrown derivatives. Synthesis, complexing and extraction properties of p-tert-butylcalix[4]arenes differing in the number of substituents containing heterocyclic imidazole systems. The aim of this work - synthesize benzoaza-15-crown-5 derivatives containing benzyl, oxyethyl, ether, ester and carboxylic groups at the Nitrogen atom. Study of the complexing properties of the obtained crown-ethers with the cations of s-elements. Determination of the relationship between the complexing and extraction abilities of the synthesized calixarene derivatives on the nature and the number of heterocyclic substituents in the molecule, for the cations of some metals s- and d-elements recognitions. The N-substituted benzoaza-15-crown-5 with benzyl, oxyethyl, ether, ester and carboxylic groups were synthesized. Using the method of spectrophotometric titration, the stability constants of complexes with cations of alkali and alkaline earth metals of bebzoaza-15-crown-5 derivatives were determined. It was found that the presence of ether oxygen atom in the side chain of benzoaza-15-crown-5 derivatives leads to an increase in the stability constants of their alkali and alkaline-earth cations complexes with due to the lariat effect. However, the formation of complexes with a composition of 2:1 (ligand-metal) is not observed, even in the case of ions with a large ionic radius. The new mono- and disubstituted at the lower rim p-tert-butylcalix[4]arenes with fragments of

the imidazole molecule which is attached to the macrocycle by linkers of different nature have been synthesized. Using the extraction method, it was shown that all imidazole-containing calixarenes exhibit the ability to extract cations of alkali, alkaline earth, and transition metals. Calixarenes with an amide group included in the substituent are effective extractants of transition metal cations. Monosubstituted calixarenes are

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.898

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Кириченко Тетяна Іванівна

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові похідні бензоаза-15-краун-5 з замісниками різної природи по атомах Нітрогену та моно- і дизаміщені п-трет-бутилкалікс[4]арени з фрагментами імідазолів, які приєднані за допомогою різних лінкерів.

Назва НТП англійською: The new derivatives of benzoaza-15-crown-5 with different nature of substituents at Nitrogen atoms and mono- and disubstituted p-tert-butylcalix[4]arenes with imidazole fragments attached to the framework using various linkers.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: органічний синтез

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Алкілуванням бензоаза-15-краун-5 етиловим естером хлорооцтової кислоти в етанолі в присутності триетиламіну отримано N-етоксикарбоксиметил-бензоаза-15-краун-5, гідроліз якого приводив до N-карбоксиметил-похідного. Взаємодією бензоаза-15-краун-5 з тозилатом монометилового етера етиленгліколю або галогенідами чи тозилатами відповідних бензилів в ацетонітрилі в присутності карбонату калію синтезовано N-метоксиетил-бензоаза-15-краун-5 і похідні бензоаза-15-краун-5, які містять по атомах Нітрогену заміщені бензильні групи. Синтез N-оксиетил-бензоаза-15-краун-5 здійснювали реакцією бензоаза-15-краун-5 з оксидом етилену в метанолі. Здйснено синтез моно- і дизаміщених по нижньому ободу п-трет-бутилкалікс[4]аренів з фрагментами імідазолів. Синтез 2-бутилімідазолутримуючих каліксаренів було реалізовано згідно розробленої методики конструювання імідазольних циклів на каліксареновому каркасі, а отримання амідних похідних здійснювали згідно за методом карбодіімідного синтезу.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції: Учбові заклади України

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Smola S., Rusakova N., Snurnikova O., Alekseeva E., Kirichenko T. Peculiarities of structure and spectral-luminescent properties of carboxymethoxy-substituted calix[4]arenes and their complexes with lanthanides. Ukrainian Chemistry Journal. – 2020. – Vol. 86, № 3. – P. 9–18. – https://doi.org/10.33609/0041-6045.86.3.2020.9-18

Smola S.S., Fadieiev Ye.N., Rusakova M.Yu., Snurnikova O.V., Alyeksyeyeva O.A., Rusakova N.V. Lower rim-modified calix[4]arenes with fragments of EDTA (DTPA) and their Ln(III) complexes (Ln=Yb, Lu): synthesis and NIR-luminescent properties. Ukrainian Chemistry Journal. – 2020. – Vol. 86, N 5. – P. 13–23. – https://doi.org/10.33609/2708-129X.86.5.2020.13-23

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович
д. х. н.

Перелік осіб-виконавців

Алєксєєва Олена Олександрівна
(к. х. н., 02.00.03)

Басок Степан Степанович
(к. х. н., 02.00.03)

Кириченко Тетяна Іванівна
(д. х. н.)

Кулигіна Катерина Юріївна
(к. х. н.)

Луцюк Анатолій Федорович

Яковенко Ірина Станіславівна

Відповідальний за підготовку облікових документів Іллюшко Н. О.

Телефон +38 (048) 793-70-78

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

