Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U006142

Державний реєстраційний номер: 0116U004042

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-02-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез біс(бензокраун-етерів), що містять сечовинні групи, як зв'язуючи краун-етерні цикли фрагменти. Вивчення комплексоутворення отриманих макроциклів з катіонами і аніонами.

Початок етапу: 01.2016

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітного документа: Проміжний 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:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 048 766-20-44: факс 048 765-96-02

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: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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.): 571.621

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез нових біс(бензокраун-етерів) і вивчення процесів утворення ними супрамолекулярних структур при взаємодії з неорганічними і органічними субстратами для створення нових матеріалів

Назва роботи англійською:

Synthesis of new bis(benzo crown ethers) and the study of the formation of supramolecular structures upon their interaction with inorganic and organic substrates for the development of new materials

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - біс(бензокраун-етери), які містять сечовинні групи, як зв'язуючи краун-етерні цикли фрагменти. Мета роботи - синтез біс(бензокраун-етерів), які містять сечовинні групи, як зв'язуючи краун-етерні цикли фрагменти, і вивчення їх комплексоутворення з катіонами і аніонами. Методи дослідження - синтетичні, УФ. ЯМР, спектроскопія, мас-спектрометрія, РСА. Показано, що реакцією між 4-аміно- і 4-ізоцианатобензокраун-етерами з виходом > 95% можуть бути отримані біс(бензокраун)сечовини як з однаковим, так і різним розміром краун-етерного циклу. Взаємодією рецептора з фрагментами бензо-15-краун-5 з метил йодидом в ДМСО у присутності гидрида натрію отримана N-метил-біс (бензокраун)сечовина. Показано, що вивчені сполуки утворюють комплекси з аніонами за рахунок утворення водневих зв'язків з NH протонами сечовинної функції і катіонами шляхом зв'язування їх з краун-етерними циклами. У кристалічному стані утворюється сендвічевий комплекс складу 2:2, в якому кожний катіон калію зв'язується з двома краун-етерними циклами різних молекул, а аніони зв'язуються сечовинними групами. Виявлено, що введення метильних груп по атомах Нітрогену біс(бензокраун)сечовин робить їх більш структурно підготовленими до утворення сендвічевих комплексів з катіонами лужних металів складу 1:1, в яких катіон металу розташовується між двома краун-етерніми фрагментами. Найбільш стійкі комплекси утворюються з катіонами калію і рубідію (lgK>7).

Реферат англійською:

Research object - bis(benzocrown ethers) containing urea groups as crown ether moieties binding fragments. A purpose of work is synthesis of bis(benzocrown ethers) containing urea groups as crown ether moieties binding fragments, and study of their complexation with cations and anions. Research methods - synthetic, UV, NMR, spectroscopy, mass spectrometry, X-ray. It was shown that by the reaction between 4-amino and 4-isocyanato benzocrown ethers can be obtained bis(benzocrown) ureas with both the same and different sized of crown ether cycle with the yield of > 95%. By the interaction of receptor with fragments of benzo-15-crown-5 with methyl iodide in DMSO in the presence of sodium hydride N-methyl-bis(benzocrown) urea was obtained. It was shown that these compounds form complexes with anions through hydrogen bonding with the NH protons of urea function and with cations by binding their by crown ether cycles. In crystals the 2:2 sandwich complex is formed, wherein each potassium cation binds by two crown ether rings of different molecules and anions bind by urea groups. It was revealed that introduction of the methyl groups on the nitrogen atoms of the bis (benzocrown) ureas makes them more structurally prepared for the formation of 1:1 sandwich complexes with alkali metal cations, in which the metal cation is positioned between the two crown ether moieties. The most stable complexes are formed with potassium and rubidium cations (lgK>7).

Індекс УДК: 547.8, 547.898

Коди тематичних рубрик: 31.21.27.07

Керівники роботи

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

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методи синтезу біс(бензокраун-етерів), які містять сечовинні групи, як зв'язуючи краун-етерні цикли фрагменти, і вивчення їх комплексоутворення з катіонами і аніонами.

Назва НТП англійською: Methods of synthesis of bis(benzocrown ethers) containing urea groups as crown ether moieties binding fragments, and study of their complexation with cations and anions.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Дослідження та розробки в галузі хімії

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Показано, що реакцією між 4-аміно- і 4-ізоцианатобензокраун-етерами з виходом > 95% можуть бути отримані біс(бензокраун)сечовини як з однаковим, так і різним розміром краун-етерного циклу. Взаємодією рецептора з фрагментами бензо-15-краун-5 з метил йодидом в ДМСО у присутності гидрида натрію отримана N-метил-біс (бензокраун)сечовина. Показано, що вивчені сполуки утворюють комплекси з аніонами за рахунок утворення водневих зв'язків з NH протонами сечовинної функції і катіонами шляхом зв'язування їх з краун-етерними циклами.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Учбові заклади

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

Кириченко Т.І., Кікоть Л.С., Кулигіна К.Ю., Ляпунов О.Ю., Богащенко Т.Ю., Шишкіна С.В., Зубатюк Р.І. Молекулярні кліпси на основі дифенілглікольурилу і бензо(дибензо)краун-етерів: синтез і взаємодія з

паракватом та його похідними. XXIV українська конференція з органічної хімії, Полтава, 19-23 вересня 2016 р. Тез. доп. - С. 21. Кікоть Л.С., Ляпунов О.Ю., Смола С.С., Богащенко Т.Ю., Кулигіна К.Ю., Русакова Н.В., Кириченко Т.І. Біскраун-етери з хіноксаліновим фрагментом: комплексоутворюючі властивості з катіонами лужних металів. XXIV українська конференція з органічної хімії, Полтава, 19-23 вересня 2016 р. Тез. доп. - С. 145.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Богащенко Т.Ю.

Кириченко Т.І.

Кулигіна Катерина Юріївна
(к. х. н.)

Кікоть Л.С.

Лобач О.В.

Ляпунов О.Ю.

Яковенко І.С.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

