

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005511

Державний реєстраційний номер: 0121U107518

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Синтез дослідних зразків 2-стиріл-піримідинів та встановлення здатності отриманих сполук до фотохімічних перетворень. Оцінка перспективності розроблених методик для створення нових матеріалів з корисними властивостями.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 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, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 744.575
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Ефективні способи утворення 2-стирилпіримідинів на основі 2-(2-гідрокси-2-арилетил)-2,3-піримідин-4(3H)-онів

Назва роботи англійською:

Effective methods for formation of 2-styrylpyrimidines based on 2-(2-hydroxy-2-arylethyl) -2,3-pyrimidin-4(3H)-ones

Реферат українською:

Об'єкти дослідження – 2-стирилпіримідини, 2-(п-гідроксиалкіл)-піримідин-4(3H)-они, 2-(2-оксо-2-арилетилсульфаніл)-піримідин-4(3H)-они. Ціль роботи – розробка ефективних методів синтезу 2-стирилпіримідинів, виходячи із 2-(п-гідроксиалкіл)-піримідин-4(3H)-онів. Методи дослідження і апаратура: ПМР-спектроскопія (Varian WXP-500), мас-спектрометрія (MX 1321). Розроблено препаративний спосіб отримання ряду 2-(п-гідроксиалкіл)-піримідин-4(3H)-онів відновленням 2-(2-оксо-2-арилетиліден)-2,3-дигідропіримідин-4(1H)-онів. Розроблено препаративний спосіб отримання сполук ряду (E)-6-R-2-стирилпіримідин-(4H)-онів шляхом дегідратації 2-(2-гідрокси-2-арилетил)піримідин-4(3H)-онів у ортофосфорній кислоті при підвищеній температурі. Вивчена можливість десульфурування 2-(2-оксо-2-арилетилсульфаніл)-піримідин-4(3H)-онів у оцтовій кислоті. З ціллю подальшої модифікації синтезовані 4-метилбензосульфонати виходячи з ряду (E)-6-метил-2-стирилпіримідин-(4H)-онів. Встановлено, що при взаємодії (E)-6-R-2-стирилпіримідин-(4H)-онів з еквімолекулярною кількістю Br₂ основним продуктом реакції виявився (E)-5-бром-6-R-2-стирилпіримідин-(4H)-он. Не встановлено факту хімічної деструкції дослідних зразків (E)-6-R-2-стирилпіримідин-(4H)-онів дією УФ-випромінювання. Будова вперше отриманих сполук встановлена за допомогою ЯМР1H-спектроскопії і мас-спектрометрії. Розроблені методики синтезу 2-стирилпіримідинів можуть суттєво спростити процеси отримання фоточутливих систем стирилпіримідинового ряду з мультифотохромними властивостями, зокрема, зі здатністю до молекулярного фотопереключення.

Реферат англійською:

The objects of research are 2-styrylpyrimidines, 2-(p-hydroxyalkyl)-pyrimidin-4(3H)-ones, 2-(2-oxo-2-arylethylsulfanyl)-pyrimidin-4(3H)-ones. The aim of the work is to develop effective methods for the synthesis of 2-styrylpyrimidines, starting from 2-(p-hydroxyalkyl)-pyrimidin-4(3H)-ones. Research methods and equipment: PMR spectroscopy (Varian WXP-500), mass spectrometry (MX 1321). A preparative method for obtaining a series of 2-(p-hydroxyalkyl)-pyrimidin-4(3H)-ones by reduction of 2-(2-oxo-2-arylethylidene)-2,3-dihydropyrimidin-4(1H)-ones was developed. The possibility of desulfurization of 2-(2-oxo-2-arylethylsulfanyl)-pyrimidin-4(3H)-ones in acetic acid was studied. A preparative method for obtaining compounds of a series of (E)-6-R-2-styrylpyrimidin-(4H)-ones by dehydration of 2-(2-hydroxy-2-arylethyl)pyrimidin-4(3H)-ones in orthophosphoric acid at elevated temperature was developed. With the aim of further modification, 4-methylbenzosulfonates were synthesized starting from a series of (E)-6-methyl-2-styrylpyrimidin-(4H)-ones. It was established that during the interaction of (E)-6-R-2-styrylpyrimidine-(4H)-ones with an equimolecular amount of Br₂, the main product of the reaction turned out to be (E)-5-bromo-6-R-2-styrylpyrimidine-(4H)-ones. The fact of chemical destruction of experimental samples of (E)-6-R-2-styrylpyrimidine-(4H)-ones under the action of UV radiation was not established. The structure of the compounds obtained for the first time was established using HNMR spectroscopy and mass spectrometry. The developed methods for the synthesis of 2-styrylpyrimidines can significantly simplify the processes of obtaining photosensitive systems of the styrylpyrimidine series with multiphotochromic properties, in particular, with the ability for molecular photoswitching.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.7/.8

Коди тематичних рубрик:31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Яволовський Аркадій Олександрович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: с.н.с., г.н.с

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методики синтезу сполук ряду (Е)-6-Р-2-стирилпіримідин-(4Н)-онів.

Дослідні зразки (0.5-1.0 г): 2-(2-гідрокси-2-фенілетил)-6-метилпіримідин-4(3Н)-он, 2-(2-([1,1'-біфеніл]-4-іл)-гідроксиетил)-6-метилпіримідин-4(3Н)-он, 2-(2-гідрокси-2-фенілетил)-6-фенілпіримідин-4(3Н)-он, 2-(2-([1,1'-біфеніл]-4-іл)-гідроксиетил)-6-фенілпіримідин-4(3Н)-он, 6-метил-2-(4-нітrostирил)піримідин-4-іл-4-метилбензосульфат, 6-метил-2-стирилпіримідин-4-іл-4-метилбензосульфат.

Назва НТП англійською: Methods of synthesis of compounds of a series of (E)-6-R-2-styrylpyrimidine-(4H)-ones. Test samples (0.5-1.0 g): 2-(2-hydroxy-2-phenylethyl)-6-methylpyrimidin-4(3H)-one, 2-(2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-hydroxyethyl)-6-methylpyrimidin-4(3H)-one, 2-(2-hydroxy-2-phenylethyl)-6-phenylpyrimidin-4(3H)-one, 2-(2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-hydroxyethyl)-6-phenylpyrimidin-4(3H)-one, 6-methyl-2-(4-nitrostyryl)pyrimidin-4-yl-4-methylbenzosulfonate, 6-methyl-2-styrylpyrimidin-4-yl-4-methylbenzosulfonate.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Науково технічна продукція складається з методик синтезу та дослідних зразків фоточутливих речовин ряду 2-стирилпіримідин-4(3Н)-онів і їх похідних, а саме: (Е)-6-метил-2-стирилпіримідин-4(3Н)-ону, (Е)-2-(2-([1,1'-біфеніл]-4-іл)вініл)-6-метилпіримідин-4(3Н)-ону, (Е)-6-феніл-2-стирилпіримідин-(4Н)-ону, (Е)-2-(2-([1,1'-біфеніл]-4-іл)вініл)-6-фенілпіримідин-4(3Н)-ону, 2-[2-(3-нітрофеніл)вініл]-6-метилпіримідин-4(3Н)-ону, 2-[2-(4-нітрофеніл)вініл]-6-метилпіримідин-4(3Н)-ону, (Е)-5-бром-6-метил-2-стирилпіримідин-4(3Н)-ону. Також НТП включає методики синтезу та дослідні зразки проміжних речовин – 2-(2-гідрокси-2-фенілетил)-6-метилпіримідин-4(3Н)-ону, 2-(2-([1,1'-біфеніл]-4-іл)-гідроксиетил)-6-метилпіримідин-4(3Н)-ону, 2-(2-гідрокси-2-фенілетил)-6-фенілпіримідин-4(3Н)-ону, 2-(2-([1,1'-біфеніл]-4-іл)-гідроксиетил)-6-фенілпіримідин-4(3Н)-ону.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: Кафедра органічної та фармацевтичної хімії Одеського національного університету імені І.І. Мечникова МОН 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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

Давтян А.С. Ефективний спосіб утворення 2-стирилпіримідин-4(3Н)-онів. Тези доп. XI Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції «Хімія і сучасні технології». – Дніпро. – 6-7 грудня 2023 року.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

д. х. н., 02.00.01, 02.00.02

Перелік осіб-виконавців

Іванов Юрій Едуардович

(к. х. н.)

Гришук Лідія Володимирівна

(к. х. н.)

Плужник-Гладир Сергій Михайлович

(к. х. н.)

Степанов Дмитро Євгенович

(к. х. н., 02.00.03)

Чіхичін Дмитро Герасимович

(к. х. н.)

Яволовський Аркадій Олександрович

(д. х. н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Іллюшко Н. О.

Телефон

+38 (067) 724-39-55

Реєстратор

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

