

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100991

Державний реєстраційний номер: 0120U100154

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Удосконалення методики отримання діамінокарбенієвих солей. Вивчення реакцій діамінокарбенів з СН-кислотними похідними сульфонів та сульфоксидів, кетонів. Синтез карбенових комплексів з функціональними групами для біологічних випробувань

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього 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: Харківське шосе, 50, м. Київ, Київська обл., 02160, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442923032, 0442923081

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, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

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): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1403.766

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Стабільні карбени гетероциклічного та ациклічного рядів. Дослідження перетворень і біологічних властивостей.

Назва роботи англійською:

Stable carbenes of heterocyclic and acyclic series. Study of transformations and biological properties

Реферат українською:

Об'єкт дослідження. Нові карбеноїдні сполуки, нуклеофільних олефінів, їх похідні для біологічних випробувань. Мета роботи – синтез нових карбеноїдних сполук та нуклеофільних олефінів, їх похідних. Вивчення їх фізико-хімічних властивостей. Методи дослідження – синтетичний, спектральні (ЯМР спектроскопія), аналітичні (хроматографічний, елементний аналіз), розрахункові (квантовохімічні дослідження). Результати НДР: Синтезовано нові карбеноїдні сполуки та нуклеофільні олефіни, їх похідні на основі систем 2-метилефенантро[9,10-d]імідазоліну, флуорозаміщених карбенів, 9,10-дигідро-8H-імідазо[3,4-a]бензоксазینیю. Вивчено напрямки реакцій нуклеофільних олефінов з сіркою, що дають гіпервалентні сполуки сірки, з тритилхлоридом, що дають стерично екрановані солі, реакції обміну йонів в азолієвих солях. Знайдено утворення комплексів карбенів з диметилсульфоном з водневим зв'язком між компонентами. Встановлено структури комплексів флуорозаміщених карбенів, 1,3-димезитил-2-метилефенантро[9,10-d]імідазоліну та комплексу 1,3-біс-(2-трифлуорометилфеніл)імідазол-2-ілідену з йодом. Методом DFT розраховані теплові ефекти реакцій карбенів з диметилсульфоном, диметилсульфоксидом, кетонами. Синтезовані сполуки перспективні для пошуку нових антимікробних та протипухлинних сполук. Галузь застосування – препаративний синтез карбеноїдних сполук, нуклеофільних олефінів та їх похідних.

Реферат англійською:

Object of study. New carbenoid compounds, nucleophilic olefins, their derivatives for biological testing. The aim of the work is the synthesis of new carbenoid compounds and nucleophilic olefins, their derivatives. Study of their physicochemical properties. Research methods – synthetic, spectral (NMR spectroscopy), analytical (chromatographic, elemental analysis), computational (quantum chemical research). Research results: New carbenoid compounds and nucleophilic olefins, their derivatives based on 2-methylenephenanthro [9,10-d]imidazoline systems, fluorosubstituted carbenes, 9,10-dihydro-8H-imidazo [3,4-a] benzoxazinium system were synthesized. The directions of reactions of nucleophilic olefins with sulfur, giving hypervalent sulfur compounds, with trityl chloride, giving sterically shielded salts, ion exchange reactions in azole salts have been studied. The formation of carbene complexes with dimethyl sulfone with a hydrogen bond between the components was found. The structures of complexes of fluoro-substituted carbenes, 1,3-dimesityl-2-methylenephenanthro [9,10-d]imidazoline and complex of 1,3-bis-(2-trifluoromethylphenyl)imidazol-2-ylidene with iodine were established. The thermal effects of carbene reactions with dimethyl sulfone, dimethyl sulfoxide, and ketones were calculated by the DFT method. The synthesized compounds are promising for the search for new antimicrobial and antitumor compounds. Field of application – preparative synthesis of carbenoid compounds, nucleophilic olefins and their derivatives.

Індекс УДК: 547, 547.7+547.78+547.79+547.339

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 суперосновних карбенів та олефінів з граничними властивостями та їх комплексів з перехідними металами

Назва НТП англійською: Methods for the synthesis of new types of superbasic carbenes and olefins with limiting properties and their complexes with transition metals

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезовано нові карбеноїдні сполуки на основі флуорозаміщених 1,2,4-триазол-5-ілідів, нуклеофільні олефіни та продукти їх взаємодії з сіркою та тритилхлоридом. Отримано цвіттеріонні сполуки на основі 1,2,4-триазол-5-ілідів та електрофілів. Встановлено структури комплексів флуорозаміщених карбенів, цвіттеріону на основі одного з 1,2,4-триазол-5-ілідів та пропансульфону, одної з похідних нуклеофільних олефінів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

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:

IX. Бібліографічний опис

1. Короткіх М.І. Раєнко, Г.Ф. , Саберов В.Ш., Єня В.І., Авксентьев О. С. , Швайка О.П. Фільність карбенів. Новий погляд. Праці НТШ, Хім. Науки. 2020. Т. 60. Р. 85-106.
- 2.. Пат. № 141798 (Україна). 1-Адамантилзаміщені циклічні формамідинієві солі / М.І.Короткіх, Г.Ф.Раєнко, В.Ш. Саберов, М.О.Деревенець.- Заявл.25.10.2019 (№ U201910605). Опубл. 27.04.2020. Бюл. № 8.
3. Пат. № 141799 (Україна). Спосіб синтезу аліфатичних похідних циклічних формамідинієвих солей / М.І.Короткіх, Г.Ф.Раєнко, В.Ш. Саберов, М.О.Деревенець.- Заявл. 25.10.2019 (№ U201910606). Опубл. 27.04.2020. Бюл. № 8.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попов Анатолій Федорович

д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Єня Василь Іванович

Гресько Сергій Володимирович

Дорошенко Тетяна Федорівна

(к. т. н., 05.26.05)

Компанець Михайло Олександрович

(к. х. н., 02.00.04)

Короткіх Владислав Миколайович

Короткіх Микола Іванович

(д. х. н.)

Монастирна Євгенія Олександрівна

Нечитайлов Максим Михайлович

(к. х. н.)

Попов Анатолій Федорович

(д. х. н., 02.00.03)

Раєнко Геннадій Федорович

(к. х. н.)

Устілко Юлія Олександрівна

Швайка Олесь Павлович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Коновкіна О.А.

Телефон

+38 (095) 408-59-49

Реєстратор

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

