Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U000915

Державний реєстраційний номер: 0116U004042

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-02-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Вивчення можливості синтезу біс(бензокраун-етерів), що містять гетероциклічні фрагменти, як зв'язуючу цикли платформу, виходячи з краунвмісних бензилів. Дослідження взаємодії синтезованих краун-сполук з різними субстратами.

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2017

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.): 745.611

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 фрагменти імідазолу. Мета роботи - синтез біс(бензокраун-етерів), які містять фрагменти імідазолу, і вивчення їх комплексоутворення з різними катіонами. Методи дослідження - синтетичні, УФ, ЯМР спектроскопія, мас-спектрометрія, РСА. Кип'ятінням краунвмістних бензилів з заміщеними бензальдегідами в оцтової кислоті в присутності ацетату амонію з виходами 51-88% отримані зв'язані імідазолом біс(бензокраун-етери), що містять у 2-му положенні імідазольного циклу бензенове кільце з різними замісниками в м- і п-положеннях. Проведена оптимізація геометрії деяких імідазолкраун-етерів і їх комплексів з катіонами натрію і калію напівемпіричним методом PM6-D3. Показано, що отримані краунвмістні імідазоли утворюють з катіонами лужних і лужноземельних металів як сендвічеві комплекси складу 1:1, так і, в більшості випадків, комплекси складу 1:2 (L:M) зі значно меншою константою стійкості. Більш стійкі комплекси утворюють сполуки, що містять 18-членні краун-етерні цикли. Серед катіонів лужних металів найбільш стійкі комплекси спостерігаються з катіонами калію і рубідію, а з лужноземельними - з катіоном барію.

Реферат англійською:

Research object - imidazole-containing bis(benzocrown ethers). A purpose of work is synthesis of imidazole-containing bis(benzocrown ethers) and study of their complexation with various cations. Research methods - synthetic, UV, NMR spectroscopy, mass spectrometry, X-ray. The boiling of crown-containing benzyls with substituted benzaldehydes in acetic acid in the presence of ammonium acetate leads to the formation of imidazole-bound bis(benzocrown ethers) with yields of 51-88%, containing a benzene ring in the 2-position of the imidazole ring with various substituents in m- and n-positions. Optimization of the geometry of some imidazole crown ethers and their complexes with sodium and potassium cations by the semiempirical PM6-D3 method is carried out. It has been shown that the obtained crown-containing imidazoles form with alkali and alkaline-earth metal cations as sandwich complexes of 1:1 composition and, in most cases, 1:2 (L:M) complexes with a significantly lower stability constant. More stable complexes form compounds containing 18-member crown-ether rings. Among alkali metal cations, the most stable complexes are observed with potassium and rubidium cations, and with alkaline earth metals with barium cation.

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: Метод синтезу біс(бензокраун-етерів), які містять фрагменти імідазолу, і вивчення їх комплексоутворення з різними катіонами.

Назва НТП англійською: The method of synthesis of imidazole-containing bis(benzocrown ethers) and the study of their complexation with various cations.

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: Кип'ятінням краунвмістних бензилів з заміщеними бензальдегідами в оцтової кислоті в присутності ацетату амонію з виходами 51-88% отримані зв'язані імідазолом біс(бензокраун-етери), що містять у 2-му положенні імідазольного циклу бензенове кільце з різними замісниками в м- і п-положеннях. Показано, що отримані сполуки утворюють з катіонами лужних і лужноземельних металів як сендвічеві комплекси складу 1:1, так і, в більшості випадків, комплекси складу 1:2 (L:M) зі значно меншою константою стійкості.

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

Kikot' L.S., Kulygina C.Yu., Lyapunov A.Yu., Shishkina S.V., Zubatyuk R.I., Bogaschenko T.Yu., Kirichenko T.I. The complexation of molecular clips containing fragments of diphenylglycoluril and benzocrown ethers with paraquat

and its derivatives. Beilstein Journal of Organic Chemistry. - 2017. - Vol. 13. - P. 2056-2067.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Богащенко Т.Ю.

Кириченко Т.І.

Кулигіна Катерина Юріївна

Кікоть Л.С.

Ляпунов О.Ю.

Яковенко І.С.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

