

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U001590

Державний реєстраційний номер: 0109U008220

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-03-2013

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Розвиток гетероциклічного синтезу на основі стабільних карбенів та каталітичних реакцій за участю карбенів. Реакції електроностабілізованих сульфенів та їх аналогів з алкенами

Початок етапу: 01.2012

Закінчення етапу: 12.2012

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:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 3116830, 3116830

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1067.9

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Стабільні карбени і їх металічні комплекси в синтезі гетероциклічних сполук і каталізі органічних реакцій

Назва роботи англійською:

Stable carbenes and their metal complexes in heterocyclic synthesis and catalysis of organic reactions

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - каталіз стабільними карбенами реакції бензоїнової конденсації, комплекси гетероароматичних карбенів з солями перехідних металів, методи синтезу та каталітичні властивості. Сульфени, реакції циклоприєднання. Мета роботи - синтез конденсованих біскарбеноїдних систем, нових типів карбенових комплексів перехідних металів для каталізу реакцій дегалогенування галогенаренів; вивчення каталізу карбенами реакції бензоїнової конденсації, напрямків реакцій циклоприєднання сульфенів до олефінів. Методи дослідження - синтетичний, кінетичний, спектральні (ЯМР спектроскопія), аналітичні (хроматографічний, елементний аналіз), квантовохімічні. Основні результати. Виявлено вискоєфективний каталіз реакції бензоїнової конденсації стабільними карбенами. Здійснено синтез нових карбенових комплексів солей перехідних металів та знайдено вискоєфективний каталіз карбеновими комплексами паладію реакції гідродегалогенування п-дихлорбензену. Вперше синтезовано нові конденсовані карбеноїди - імідазоліо[4,5-d]імідазолієві солі та їх похідні імідазо[4,5-d]імідазол-2,5-дитіони. Нові карбеноїди призначені для отримання планарних полімерних кон'югованих карбенових комплексів перехідних металів. Встановлено, що реакції циклоприєднання заміщених сульфенів та їх азотовмісних аналогів до алкенів, зокрема, діалкіламіностиролів приводять до утворення відповідних заміщених ізомерів - цис- і транс-тіетан-S,S-діоксидів, а також 1,2-тіазетидин-S-оксидів і S,S-діоксидів - аналогів сполук з анальгетичними властивостями. Показано, що у ряді випадків ці реакції протікають стереоспецифічно, будова алкена при цьому є вирішальною. Отримані дані мають значення для препаративного синтезу карбенових комплексів перехідних металів - каталізаторів реакції дегалогенування галогенаренів, каталізу карбенами реакції бензоїнової конденсації, синтезу гетероциклічних сполук на основі карбенів та їх аддуктів - сульфенів. Галузь застосування - каталіз реакцій бензоїнової конденсації та дегалогенування галогенаренів, синтез карбенових комплексів перехідних металів, синтез гетероциклічних сполук на основі сульфенів.

Реферат англійською:

Object of the study is catalysis of benzoin condensation by stable carbenes, complexes of heteroaromatic carbenes with transition metal salts, methods for their synthesis and catalytic properties, cycloadditions of sulfenes. The goal of the work is synthesis of annulated biscarbenoid systems, new types of carbene complexes of transition metals to catalyze the hydrodehalogenation of halogenarenes; study of catalysis by carbenes of benzoin condensation, directions of sulfene cycloadditions. Methods of the study are synthetic, kinetic, spectral (NMR spectroscopy), analytical (chromatographical, elemental analysis), quantum-chemical. Basic results. Effective catalysis of benzoin condensation by stable carbenes and a highly effective catalysis of hydrodehalogenation of p-dichlorobenzene by palladium carbene complexes were found. New annulated carbenoids namely imidazolium salts and their derivatives imidazo[4,5-d]imidazol-2,5-dithions were synthesized. The new carbenoids are designed for the preparation of planar conjugated polymer carbene complexes of transition metals. It was found that cycloadditions of substituted sulfenes and their nitrogen containing analogues to alkenes, particularly to dialkylaminostyrenes, lead to form the corresponding substituted isomers - cis- and trans-thietan-S,S-dioxides, and also 1,2-thiazetidin-S-oxides and S,S-dioxides as analogues of compounds with analgetic properties. It was shown that in some cases these reactions proceed stereospecifically for which the structure of alkene is decisive. The obtained data have significance for preparative synthesis of transition metal carbene complexes as catalysts for hydrodehalogenation of halogenarenes, catalysis by carbenes of benzoin condensation,

synthesis of heterocyclic compounds on the basis of carbenes and sulfenes as carbene adducts. The scope of application is catalysis of benzoin condensation and hydrodehalogenation of halogenarenes, synthesis of transition metal carbene complexes, synthesis of heterocyclic compounds on the basis of sulfenes.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.78+547.79

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

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 карбенових комплексів перехідних металів (нікелю, паладію, заліза, кобальту, міді(I)) зі стеричним екрануванням карбенометалічного фрагменту

Назва НТП англійською: Methods for the synthesis of transition metal carbene complexes (nickel, palladium, iron, cobalt, copper(I)) with a sterical shielding of carbene metal fragment

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 – Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено метод синтезу карбенових комплексів перехідних металів зі стеричним екрануванням карбенометалічного фрагменту, що полягає у взаємодії стабільних карбенів з солями металів в інертному розчиннику.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: не визначено

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства фармацевтичної і хімічної галузей промисловості

Перспективні ринки: Україна, країни СНД, можливо, країни Євросоюзу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): не визначено

Додаткова інформація: За договорами

IX. Бібліографічний опис

1. Heterocyclic carbene complexes of nickel, palladium, and copper(I) as effective catalysts for the reduction of ketones [Text] / Korotkikh N.I., Saberov V.Sh., Kiselev A.V., Glinyanaya N.V., Marichev K.A., Pekhtereva T.M., Dudarenko G.V., Bumagin N.A., Shvaika O.P. // Chem. Heter. Comp.- 2012.- Vol. 47, № 12.- P. 1551 – 1560. 2. A Base Induced Transformation of a 1,3-Dimethyl-1,3-di(1-adamantyl)formamidine Salt into ?-[Methyl-(1-

adamanty]amino]acrylonitriles in Aliphatic Nitriles [Text] / Knishevitsky A.V., Korotkikh N.I., Cowley A.H., Moore J.A., Vasudevan K.V., Pekhtereva T.M., Shvaika O.P. // ARKIVOC.- 2012.- № 2.- P. 60 - 73. 3. Синтез і перетворення макроциклічних карбеноїдів ряду азолів [Текст] / Марічев К.О., Короткіх, М. І. Кисельов А. В., Папаяніна О. С., Дударенко Г. В., Швайка О.П. // Наук. праці ДонНТУ. Сер.: Хімія і хім. технологія.- 2012. - № 18. - С. 100 - 107.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попов Анатолій Федорович

Перелік осіб-виконавців

Єня Василь Іванович

Глиняна Наталія Валеріївна

Дорошенко Тетяна Федорівна

Кисельов Артем Вікторович

Кисельова Ольга Леонідівна

Кнішевицький Артур Володимирович

Ковач Микола Анатолійович

Короткіх Микола Іванович

Лящук Сергій Миколайович

Марічев Костянтин Олександрович

Орлов Максим Артурович

Раєнко Геннадій Федорович

Саберов Вагіз Шамільйович

Швайка Олесь Павлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

