Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U006183

Державний реєстраційний номер: 0114U002762

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-03-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Отримати низку нових функціоналізованих 2-алкіліденпіримідинів (2-АП). Виявити можливість використання спектрально-люмінесцентних особливостей отриманих сполук для оцінки фізико-хімічних властивостей мікросередовища та міжмолекулярних взаємодій.

Початок етапу: 04.2014

Закінчення етапу: 12.2014

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.): 70

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез нових похідних піримідинів та їх комплексів з d- та f-металами, як базових сполук для створення нових випромінювачів у широкому спектральному діапазоні та каталітичних систем перетворень гліцерину (відходу виробництва біодизелю) та його похідних в речовини і матеріали "малотоннажної хімії"

Назва роботи англійською:

Synthesis of new pyrimidines derivatives and their complexes with d- and f-metals as base compounds for formation of new emitters in a wide spectral range and catalytic systems of transformations of glycerol (biodiesel waste product) and its derivatives into substances and materials of "fine chemicals"

Реферат українською:

Досліджено умови реакції 6-метил- та 6-феніл-2-тіоурацилу з рядом галогеноалканів, активованих нітрильними групами, в результаті чого розроблено однореакторний спосіб синтезу 2-алкіліден-1,3-дигідропіримідин-4-онів. Встановлено, що спектри поглинання розчинів досліджуваних похідних піримідину характеризуються широкими смугами в УФ-області, які відповідають ?-?*-переходам (?макс.=214-362 нм, lg?=4,0-4,7). При введенні ароматичних замісників спостерігається батохромний зсув смуг поглинання на 30-60 нм і підвищення інтенсивності поглинання у двічі. Сполуки також характеризуються широкими смугами флуоресценції в області 380-550 нм, а квантові виходи знаходяться у межах 0,0295-0,0862. Аналогічне також характерне для спектрів фосфоресценції, яка спостерігається в області 420-680 нм. В комплексах лантанідів з похідними піримідину інтенсивній люмінесцентний сигнал спостерігається в комплексах з 2-алкіліден-піримідинами, що містять у положенні "2" циклу ацетильні, етоксікарбонільні та нітрильні групи. Для таких комплексів люмінесценція фіксується у видимій (Eu(III) і Tb(III)) та ближній ІЧ (іони Yb (III)) областях.

Реферат англійською:

The reaction conditions of 6-methyl- and 6-phenyl-2-thiouracil with halogenoalkanes, activated by nitrile groups, are investigated; as result, preparation of 2-alkyliden-1,3-dihydropyrimidine-4-ones is worked out. It is set that the absorption spectrums of pyrimidines derivatives solutions are characterized by wide bands in UV, that correspond ?-?*- transition (?max=214-362 nm, lg?=4,0-4,7). There is bathochromic shift of absorption bands on 30-60 nm and increase of absorption intensity in two times at introduction of aromatic substituents. Compounds are also characterized by the wide fluorescence bands at 380-550 nm and quantum yields are 0,0295-0,0862. It is also characteristically for the phosphorescence that is observed in area of 420-680 nm. Intensive luminescent signal is observed in lanthanides complexes with 2-alkylidenepyrimidines containing in position "2" acetyl, ethoxycarbonyl, and nitrile groups. For such complexes luminescence is fixed in visible (Eu (III) and Tb (III)) and near IR (Yb (III)) areas

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.7/8; 547.426;547.426.2;535.37; 541,49; 542.61; 542.97;542.973 546.562

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Камалов Герберт Леонович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Однореакторний спосіб синтезу 2-алкіліден-1,3-дигідропіримідин-4-онів взаємодією реагентів, що мають у екзоциклічній частині молекули карбонільні, дикарбонільні, нітрильні та ін. групи у спирті. Спектрально-люмінесцентні характеристики 2-алкіліденпіримідинів і їх лантанідвмісних (Eu(III), Tb(III), Yb (III)) комплексів.

Назва НТП англійською: Preparation of 2-alkyliden-1,3-dihydropyrimidine-4-ones by interaction of reagents, containing in exocyclic part carbonyl, dicarbonyl, nitrile etc groups, in an alcohol. Spectral-luminescent characteristic of 2-alkylidenepyrimidines and them lanthanide-containing (Eu (III), Tb (III), Yb (III)) complexes.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Хімічна промисловість

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Досліджено умови реакції 6-метил- та 6-феніл-2-тіоурацилу з рядом галогеноалканів, активованих нітрильними групами, в результаті чого розроблено однореакторний спосіб синтезу 2-алкіліден-1,3-дигідропіримідин-4-онів, який полягає у взаємодії реагентів у спирті. У випадку нітрилів, в лужному середовищі, встановлена можливість зміни напряму реакції - в цих умовах переважно відбувається внутрішньомолекулярна циклізація з утворенням тіазоло[3,2-а]піримідин-5-ону. Інший варіант спостерігається при використанні нециклічних галоген -дикетонів. Взаємодія 6-метил-2-тіоурацилу з -хлороацетилацетоном або -бромодибензоїлметаном супроводжується кислотним розщепленням проміжних S-алкілпохідних до 2-оксопропілтіопіримідину та 2-оксо-2-фенілетилтіопіримідину, відповідно. Порівнюючи реакційну здатність 6-метил- та 6-феніл-2-тіоурацилів, можна констатувати, що в цілому останні значно менш схильні до екструзії сульфуру. Досліджувані сполуки характеризуються інтенсивним поглинанням в УФ-області та широкими смугами флуоресц

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2016

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Хімічна галузь

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

Яволовский А.А., Ганин Э.В., Фонарь М.С. Пиримидины с функциональными группами со связями азот-кислород и азот-сера, N-оксиды 1,2,5-окса-, тиа- и селендиазоло[3,4-d]пиримидинов. В кн. "Химия гетероциклических соединений. Современные аспекты. М.:МБФНП. - 2014. - Т. 1. - С. 582-587.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Іванов Ю.Е.

Камалов Г.Л.

Коровін О.Ю.

Русакова Наталя Володимирівна
(д. х. н.)

Снурнікова Н.В.

Фадєєв Є.М.

Яволовський А.О.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

