

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100992

Державний реєстраційний номер: 0117U000021

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Дослідження будови та антирадикальної активності модифікованих поліфенолів

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, 380442262341

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.): 1691.082

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Отримання біологічно-активних сполук і мономерів на основі принципів супрамолекулярного каталізу та "зеленої" хімії

Назва роботи англійською:

Obtaining of biologically active compounds and monomers based on the principles of supramolecular catalysis and "green" chemistry

Реферат українською:

Об'єкти дослідження - госсипол, похідні госсипола, кверцетин, рутин, N-оксиди піридину, внутрішньомолекулярні водневі зв'язки. Мета роботи - розробити метод модифікації поліфенолів рослинного походження шляхом ацилювання фенольних гідроксилів змішаними ангідридами карбонових кислот, з використанням методу інверсійного трансфазного каталізу в двофазній системі вода - органічний розчинник. Метод відповідає вимогам "зеленої хімії" і дозволяє проводити реакції в водному середовищі за м'яких умов, а також суттєво зменшити використання токсичних і дорогих органічних розчинників. Дослідження спрямовані на отримання нових сполук з високою антирадикальною активністю на основі природних поліфенолів рослинного походження, вивчення їх будови, фізико-хімічних характеристик та антиоксидантних властивостей. Методи дослідження - ІЧ спектроскопія, УФ спектроскопія, ядерний магнітний резонанс, обернено-фазова високоефективна рідинна хроматографія, квантовохімічні розрахунки, загальні прийоми синтетичної та препаративної хімії. Досліджено реакцію отримання змішаних ангідридів карбонових кислот методом ІТК. Визначено оптимальні умови проведення синтезу (каталізатор, температура, розчинник). Проведено каталітичне ацилювання гідроксильних груп флавонолів - кверцетину і рутину ангідридами карбонових кислот. Встановлено вплив температури, природи каталізатора і розчинника на перебіг досліджуваної реакції. Показано, що використання методу ІТК дозволяє проводити реакцію ацилювання в м'яких умовах. За допомогою високоефективної рідинної хроматографії охарактеризовано склад продуктів реакції. Досліджено антирадикальну активність модифікованих поліфенолів в реакції зі стабільним радикалом ДФПГ. Встановлено стехіометрію комплексів госсипола і ряду похідних госсипола з іонами феруму II. Методами квантової хімії із залученням даних ПМР спектроскопії досліджено внутрішньомолекулярні водневі зв'язки для ряду імінопохідних госсипола.

Реферат англійською:

Research objects - gossypol, gossypol derivatives, quercetin, rutin, pyridine N-oxides, intramolecular hydrogen bonds. Purpose of the work - to develop a method of natural polyphenols modification by acylation of phenolic hydroxyl groups with the mixed anhydrides of carboxylic acids, using the inverse phase transfer catalysis in a two-phase system water-organic solvent. The method meets the requirements of "green chemistry" and allows carrying out the reactions in an aqueous medium under mild conditions, as well as significantly reducing toxic and expensive organic solvents usage. The researches are aimed at obtaining new compounds with high radical scavenging activity based on natural polyphenols, studying their structure, physicochemical characteristics, and antioxidant properties. Research methods - IR spectroscopy, UV-Vis spectroscopy, nuclear magnetic resonance, reversed-phase high-performance liquid chromatography, quantum chemical calculations, general techniques of synthetic and preparative chemistry. The synthesis of mixed anhydrides of carboxylic acids by the IPTC method was investigated. The optimal synthesis conditions (catalyst, temperature, solvent) were determined. Catalytic acylation of flavonol (quercetin and rutin) hydroxyl groups was carried out with the anhydrides of carboxylic acids. The influence of the temperature, catalyst nature, and solvent on the course of this reaction was established. It was shown that the IPTC method allows carrying out the acylation reaction under mild conditions. The reaction products were characterized by high-performance liquid chromatography. The radical scavenging activity of the

modified polyphenols in the reaction with a stable DPPH radical was investigated. The stoichiometry of gossypol and its derivatives complexes with ions of iron (II) was established. The intramolecular hydrogen bonds for several gossypol imine derivatives were investigated using quantum chemistry and PMR spectroscopy.

Індекс УДК: 547.892+547.724.2+544.431.7+544.472.3+544.424 : 547.565

Коди тематичних рубрик:

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Попов Анатолій Федорович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Метод модифікації природних поліфенолів в умовах інверсійного трансфазного каталізу

Назва НТП англійською: Method of modification of natural polyphenols under inverse phase transfer catalysis

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: Запропоновано метод модифікації природних поліфенолів рослинного походження з використанням змішаних ангідридів карбонових кислот як ацилюючих агентів. Отримано ряд естерних похідних рутину і кверцетину і досліджено їх антирадикальну активність. Показано, що використання методу ІТК дозволяє проводити реакцію ацилювання в м'яких умовах. За допомогою високоефективної рідинної хроматографії охарактеризовано склад продуктів реакції.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів, Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції: Хімічна промисловість

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:

IX. Бібліографічний опис

1. Anishchenko V.N., Redko A.N., Rybachenko V.I. Efficient Tosylation of Dihydroxybenzenes in a Two-Phase Water-Dichloromethane System. Theoretical and Experimental Chemistry. 2020. Vol. 56, Is. 1. P. 46-49.
2. Дикун О.М., Аніщенко В.М., Редько А.М., Рибаченко В.І., Бензоїлювання госиполу з використанням бензоїлхлориду і бензойного ангідриду як ацилюючих агентів. Питання хімії та хімічної технології. 2020. № 6. С. 44-49.
3. Аніщенко В.М., Редько А.М., Рибаченко В.І. Каталітична естерифікація спиртових гідроксильних груп. Хімічні проблеми сьогодення : зб. тез доп. міжнар. наук. конф., м. Вінниця, 25-27 берез. 2020 р. Вінниця, 2020. С. 69.
4. Дикун О.М., Редько А.М., Аніщенко В.М., Рибаченко В.І. ПМР та ІЧ спектроскопічне дослідження будови основ шиффа госиполу. Хімічні проблеми сьогодення : зб. тез доп. міжнар. наук. конф., м. Вінниця, 25-27 березня 2020 р. Вінниця, 2020. С. 109.
5. Anishchenko V.N., Anishchenko H.V. Catalytic synthesis of fatty esters of alcohols. Проблеми та досягнення сучасної хімії : зб. тез доп. XXI наук. молодіж. конф., м. Одеса, 7-8 травня 2020 р. Одеса, 2020. С. 9.
6. Дикун О.М., Аніщенко В.М., Редько А.М., Рибаченко В.І. Бензоїлювання госиполу з використанням бензоїлхлориду і бензойного ангідриду як ацилюючих агентів. Хімічні Каразінські читання - 2020 : зб. тез доп. XII Всеукраїнської наук. конф. студ. та аспір., м. Харків, 21-23 квітня 2020 р. Харків, 2020. С. 81-82.
7. Anishchenko V.N., Redko A.N., Rybachenko V.I., Matvienko A.G. Acylation of phenols under inverse phase-transfer catalysis. 5th Green and Sustainable Chemistry Conference. Dresden, 10-11 November 2020.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попов Анатолій Федорович

д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Єфімова Ірина Владиславівна

(к. х. н.)

Аніщенко Віктор Миколайович

(к. х. н., 02.00.04)

Аніщенко Ганна Володимирівна

Дикун Олексій Михайлович

(к. х. н.)

Корженевська Надія Галактіонівна

(к. х. н.)

Куц Ольга Василівна

(д. х. н., 02.00.04)

Матвієнко Анатолій Григорович

(д. х. н., 02.00.04)

Остапук Світлана Миколаївна

Редько Андрій Миколайович

(к. х. н., 02.00.04)

Рибаченко Володимир Іванович

(д. х. н., 02.00.04)

Тамаркіна Юлія Володимирівна

(к. х. н.)

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

