

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U001152

Державний реєстраційний номер: 0115U003537

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-01-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Розвиток синтезу гетероциклічних сполук на основі стабільних карбенів та карбеноїдів

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2017

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: 5596675, 5596686

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут органічної хімії
НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон:

Внесок співвиконавця у звітний етап:

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.): 907.176
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Стабільні карбени нового покоління та їх похідні. Синтез і властивості

Назва роботи англійською:

Stable carbenes of a new generation. Synthesis and properties

Реферат українською:

Об'єкт дослідження. Нові стабільні карбени, їх прекарбенові форми для створення високоефективних каталізаторів реакції відновного дегалогенування (гідродегалогенування) галогенаренів та реакції відновлення кратних зв'язків спиртами в лужному середовищі. Мета роботи – синтез нових стабільних карбенів нового покоління з метою їх використання для синтезу каталізаторів реакцій гідродегалогенування галогенаренів та відновлення кратних зв'язків спиртами в лужному середовищі. Методи дослідження – синтетичний, спектральні (ЯМР спектроскопія), аналітичні (хроматографічний, елементний аналіз). Результати НДР : Розроблено синтез прекарбенів ряду піридину та піримідину, виходячи з незаміщеного та 3,5-дизаміщеного піридинів. Здійснено синтез 3,5-диморфолінопіридину з 3,5-дибромпіридину в присутності трет-бутоксиду натрію та карбенокомплексного каталізатора (реакція Бухвальда-Хартвіга. Кватернізацією 3,5-диморфолінопіридину тритилхлоридом та бромадамантаном отримано відповідні прекарбени. Розроблено синтез прекарбенових солей 1,3-ді(1-адамантил)-5,6-дигідро-4Н-піримідинію. Одержано нові функціоналізовані комплекси міді(І) з високим стеричним захистом металічного центра. Синтезовано хелатні карбенові комплекси на основі системи 1-о-оксидофенілбензімідазол-2-ілідену та прекурсор до мезоїонного карбену 1,2,3-тримезитил-5-фенілімідазолію-4-іду. Отримані прекарбени та карбеноїди є перспективними вихідними сполуками для синтезу високоефективних каталізаторів реакції трансестерифікації, гідродегалогенування галоаренів, відновлення кратних зв'язків проведення функціоналізації (ціанування та трифторметилування) органічних сполук. Методом DFT проведено розрахунки енергій димеризації великої кількості карбенів та визначено найстабільніші системи. Отримані дані мають значення для розвитку препаративного синтезу стабільних карбенів та їх прекурсорів, каталізу реакцій відновлення кратних зв'язків та галогенаренів, функціоналізації органічних сполук. Галузь застосування – синтез стабільних карбенів та їх прекурсорів, каталіз реакції гідродегалогенування галогенаренів та інших реакцій. В подальшому передбачається синтез та вивчення ефективності нових каталізаторів відновних процесів на основі синтезованих карбенів.

Реферат англійською:

The object of the study is new stable carbenes and their precarbene forms for creating highly efficient catalysts for the reductive dehalogenation (hydrodehalogenation) of haloarenes and reduction of multiple bonds by alcohols in alkali medium. The purpose of the work is the synthesis of stable carbenes of a new generation in order to use them for the synthesis of the catalysts for reactions of hydrodehalogenation of haloarenes and reduction of multiple bonds by alcohols in alkali medium. Methods of research are synthetic, spectral (NMR spectroscopy), analytical (chromatographic, elemental analysis). The synthesis of precursors for a number of pyridine and pyrimidine carbenes has been developed starting from unsubstituted and 3,5-disubstituted pyridines. The synthesis of 3,5-dimorpholinopyridine was carried out from 3,5-dibromopyridine in the presence of sodium tert-butoxide and a carbene complex catalyst (the Buchwald-Hartwig reaction). The respective precarbenes were synthesized by quaternization of 3,5-dimorpholino-pyridine with trityl chloride or 1-bromoadamantane. The synthesis of the precarbene 1,3-di-(1-adamantyl)-5,6-dihydro-4H-pyrimidinium salts was carried out. The new functionalized complexes of copper (I) with high steric protection of the metal center were synthesized. The chelated carbene complexes based on the system of 1-oxidophenylbenzimidazol-2-ylidene and the precursor to the mesoionic carbene 1,2,3-trimethyl-5-phenylimidazolium-4-ide were also prepared. The precarbenes and

carbenoids obtained are promising starting compounds for the synthesis of highly efficient catalysts of the transesterification reaction, hydrodehalogenation of haloarenes, reduction of multiple bonds, functionalization (cyanomethylation and trifluoromethylation) of organic compounds. Using the DFT method the calculations of the dimerization energies of a number of carbenes were carried out identifying the most stable systems. The obtained data are important for the development of the preparative synthesis of stable carbenes and their precursors, catalysis of the reactions of reduction multiple bonds and haloarenes, and the functionalization of organic compounds. The field of application is the synthesis of stable carbenes and their precursors, catalysis of the haloarene hydrodehalogenation and other organic reactions. In the future, synthesis and study of the efficiencies of new catalysts of reduction processes on the basis of synthesized carbenes are foreseen.

Індекс УДК: 547, 547.78+547.79

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 карбенів на основі імідазол-2-ілідів, конденсованих аналогів та їх комплексів з перехідними металами.

Назва НТП англійською: Methods for the synthesis of new types of carbenes on the basis of imidazol-2-ylidenes, fused analogues, and their complexes with transition metals.

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 синтез прекарбенів ряду піридину та піримідину, виходячи з незаміщеного та 3,5-дизаміщеного піридинів. Здійснено синтез 3,5-диморфолінопіридину з 3,5-дибромпіридину в присутності трет-бутоксиду натрію та карбенокомплексного каталізатора (реакція Бухвальда-Хартвіга. Кватернізацією 3,5-диморфолінопіридину тритилхлоридом та бромадамантаном отримано відповідні прекарбени. Розроблено синтез прекарбенових солей 1,3-ді(1-адамантил)-5,6-дигідро-4Н-піримідинію. Одержано нові функціоналізовані комплекси міді(І) з високим стеричним захистом металічного центра. Синтезовано хелатні карбенові комплекси на основі системи 1-о-оксидофенілбензімідазол-2-ілідену та прекурсор до мезойонного карбену 1,2,3-тримезитил-5-фенілімідазолію-4-іду. Отримані прекарбени та карбеноїди є перспективними вихідними сполуками для синтезу високоефективних каталізаторів реакції трансестерифікації, гідродегалогенування галоаренів, відновлення кратних зв'язків проведення функціоналізації (ціанування та трифторметилування) органічних

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Не визначалися

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Підприємства міністерства надзвичайних ситуацій, фармацевтичні та хімічні підприємства.

Перспективні ринки: Не визначалися

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 визначався

Додаткова інформація: Не визначалися

IX. Бібліографічний опис

1.Synthesis and properties of heteroaromatic carbenes of the imidazole and triazole series and their fused analogues / N.I. Korotkikh, A.H. Cowley, J.A.C. Clyburne, K.N. Robertson, V.Sh. Saberov, N.V. Glinyanaya, G.F. Rayenko, O.P. Shvaika // Arkivoc. 2017. № 1. P. 257–355. 2.Highly Efficient Carbene and Polycarbene Catalysis of the Transesterification Reaction. K.A. Marichev, N.I. Korotkikh, A.H. Cowley, A.V. Knishevitsky, V.Sh. Saberov, N.V. Glinyanaya, G.F. Rayenko, O.P. Shvaika // Arkivoc. 2017. № 4. P. 365 – 376. 3.Патент 115633. Спосіб отримання 5-незаміщених 1,3,4-триарил-1,2,4-триазолієвих солей / М.І.Короткіх, Н.В.Глиняна, Г.Ф.Раєнко, О.П.Швайка. Заявл. 19.08.2016. № а 2016 8935. Опубл. 27.11.2017. Бюл. № 22.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попов Анатолій Федорович

Перелік осіб-виконавців

Єня Василь Іванович

Дзюба Оксана Іванівна

Ковач Микола Анатолійович

Короткіх Владислав Миколайович

Короткіх Микола Іванович

Раєнко Геннадій Федорович

Скоробогатова Зоя Михайлівна

Ткачук Юлія Валентинівна

Устілко Юлія Олександрівна

Швайка Олесь Павлович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

