Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0216U000041

Державний реєстраційний номер: 0111U002395

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-01-2016

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Синтез нових молекулярних кліпсів на основі дифенілглікольурилу і бензо- або дибензокраун-етерів. Розробка методів отримання макротрициклічних рецепторів на їх основі. Вивчення їх структури, властивостей, взаємодії з неорганічними і органічними субстратами

Початок етапу: 01.2015

Закінчення етапу: 12.2015

Вид звітного документа: Остаточний 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: Міністерство освіти і науки 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.): 661.7

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Флуоренонокраунофани, флуоренокраунофани і молекулярні кліпси на основі дифенілглікольурилу як нові молекулярні рецептори неорганічних і органічних субстратів

Назва роботи англійською:

Fluorenonocrownophanes, fluorenocrownophanes and molecular clips on the basis of diphenylglycoluril as new molecular receptors of inorganic and organic substrates

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - молекулярні кліпси на основі дифенілглікольурилу і дибензокраун-етерів. Мета роботи - синтез нових рецепторів, які містять фрагменти дифенілглікольурилу і бензо(дибензо)краун-етерів, вивчення їх структури і взаємодії з катіонами лужних металів і паракватом. Методи дослідження - синтетичні, УФ. ЯМР, спектроскопія, мас-спектрометрія, РСА. Показано, що задовільних виходів молекулярних кліпс, що містять фрагменти дифенілглікольурилу і дибензокраун-етерів, використовуючи реакцію біс-етера дифенілглікольурилу з дибензокраун-етерами в поліфосфорної кислоті, можна досягти лише при захисті одного з бензолових кілець краун-етеру. Спектрофотометричним титруванням визначені константи стійкості і склад комплексів, що утворюються, при взаємодії молекулярних кліпс з фрагментами дибензокраун-етерів з катіонами лужних металів і паракватом. Виявлена відмінність в рядах селективності взаємодії з катіонами лужних металів молекулярних кліпс на основі бензо- і дибензо-18-краун-6, спричинене утворенням структури типу "псевдокриптанд". Виявлена додаткова стабілізація комплексу з паракватом молекулярної кліпси на основі тетрафтордибензо-18-краун-6 за рахунок термінальних тетрафторбензолових фрагментів, що підтверджується даними РСА.

Реферат англійською:

Research object - Molecular clips based on diphenylglycoluril and dibenzocrown ethers. A purpose of work is synthesis of new receptors containing fragments of the diphenyl glycoluril and benzo(dibenzo) crown ethers, study of their structure and interactions with the cations of the alkali metals and paraquat. Research methods - synthetic, UV, NMR, spectroscopy, mass spectrometry, X-ray. We have shown that satisfactory yields of molecular clips containing the fragments of dibenzo-crown ethers, by the reaction of diphenylglycoluril's bisether with dibenzocrown ethers in polyphosphoric acid, can be achieved only with the protection of one of the benzene rings of the crown ether. Stability constants and stoichiometry of the complexes of molecular clips with alkali metal cations, and paraquat were determined by spectrophotometric titrations. The differences at the rows of the selectivity of the reaction molecular clips based on benzo- and dibenzo-18-crown-6 with alkali metal cations due to the formation of the structure of the "psevdo cryptand" were revealed. We have shown the additional stabilization of the complex with paraquat of molecular clips based on tetrafluorodibenzo-18-crown-6 due to the tetrafluorobenzene terminal fragments, which was confirmed by X-ray.

Індекс УДК: 546;54-386, 547.898

Коди тематичних рубрик: 31.17

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: Методи синтезу макроциклічних рецепторів на основі дифенілглікольурилу і бензо(дибензо)краун-етерів, вивчення їх структури, властивостей та взаємодії з неорганічними та органічними субстратами.

Назва НТП англійською: Methods of synthesis of macrocyclic receptors based on diphenylglycoluril and benzo(dibenzo) crown ethers, study of their structure and properties, interaction with inorganic and organic substrates.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: органічний синтез

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Показано, що задовільних виходів молекулярних кліпс, що містять фрагменти дифенілглікольурилу і дибензокраун-етерів, використовуючи реакцію біс-етера дифенілглікольурилу з дибензокраун-етерами в поліфосфорної кислоті, можна досягти лише при захисті одного з бензолових кілець краун-етеру. Спектрофотометричним титруванням визначені константи стійкості і склад комплексів, що утворюються, при взаємодії молекулярних кліпс з фрагментами дибензокраун-етерів з катіонами лужних металів і паракватом.

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

1.Ляпунов А.Ю. Молекулярные клипсы на основе краун-эфиров: потенциальные рецепторы для извлечения катионов Sr2+ // Вісн. Одеськ. нац. ун-ту. Сер. хімія. - 2014.- Т. 19.- вип. 3(51). - С. 52-59. 2. Kikot' L.S., Lyapunov A.Yu., Bogaschenko T.Yu., Smola S.S., Kulygina C.Yu., Kirichenko T.I. Facile Synthesis of Bis(crown ether)benzils: prospective building blocks for metal ion sensors. // Synthetic communications. - 2015. - Vol. 45, № 4. - P. 488-494. 3. Lyapunov A., Kirichenko T., Kulygina C., Zubatyuk R., Fonari M., Doroshenko A., Kirichenko A. New fluorenonocrownophanes with azobenzene moiety: synthesis, properties and interaction with paraquat. // Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry. - 2015. - Vol. 81, № 3. - P. 499-508.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Богащенко Т.Ю.

Кириченко Т.І

Кулигіна К.Ю.

Кікоть Л.С.

Лобач О.В.

Ляпунов О.Ю

Яковенко І.С.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

