Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U005678

Державний реєстраційний номер: 0109U001090

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-02-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Вивчити кінетику реакції розкладу пероксиду гідрогену, що каталізується досліджуваними комплексами, у відсутності та присутності ДБЕ і ЦГ. Виявити схожість і відмінності каталітичних властивостей комплексів в рідинофазному окисленні ДБЕ і ЦГ повітрям і пероксидом гідрогену

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2013

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: 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.): 877.3

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив складу та структури комплексів 3d металів з N-, O- та S-вмисними гетеро- і макрогетероциклічними полідентатними лігандами на утворення та розрив пероксо-зв'язків (O-O) в умовах каталітичного рідинофазного окислення органічних субстратів

Назва роботи англійською:

The influence of composition and structure of 3d metal complexes with N-, O- and S-containing hetero- and macrocyclic polydentate ligands on peroxo-bonds (O-O) formation and decomposition in catalytic liquid-phase oxidation of organic substrates

Реферат українською:

Об'єкти дослідження: моно- і поліядерні карбоксилати 3d металів, дибензиловий етер, циклогексен, пероксид гідрогену, аеросил та краун-сполуки. Мета досліджень: встановлення закономірностей утворення та розкладу продуктів та інтермедіатів рідиннофазного окислення органічних субстратів повітрям і пероксидом гідрогену, що каталізуються моно-, бі- і поліядерними комплексами 3d перехідних металів. Методи дослідження: кінетика, сорбція, коливальна, електронна і ЯМР спектроскопія, мас-спектрометрія, тонкошарова і газорідинна хроматографія, потенціометрія. Вивчено зв'язок між складом і структурою більше 80 різноманітних моно- і гетероядерних карбоксилатних комплексів 3d перехідних металів різної будови, що містять півалатні, 4,5-диметилпіразолатні, 4,5-ди(трифторметил)піразолатні, дипіридильні, трифлатні та фенантролинові ліганди, з їх каталітичними властивостями в розкладі пероксиду гідрогену, окисленні дибензилового етеру та циклогексену повітрям і пероксидом гідрогену. Розроблені методи синтезу, вивчені структура і властивості нових полідентатних лігандів - краун-етерів. Отримані комплекси краун- етерів(КЕ) з дипероксохлорохроматом та хлорохроматом калію, комплекси бензо- і 4'-бромбензо-18-краун-6 з HAuBr4, які ізоструктурні аналогічним комплексам HAuCl4. Досліджена кінетика розкладання nКУ·KCrO5Cl до відповідних комплексів nКЕ·KCrO3Cl (n=1,2). Визначені порядки і швидкості розкладу початкового комплексу. Розроблені і вдосконалені методи синтезу піримідинів, що містять кетоіміний фрагмент, лігандів на основі 5-нітрозопіримідинів і імідазол-4,5-дикарбонової кислоти, ізомерних N-оксидів 2-феніл-1,2,3-триазолів, поліфункціональних N-вмісних лігандів, а також бігетеро- арильних сполук на основі гидразонів і оксимів 2--оксоалкілпіримідинів. По цих методах отримано більше 60 зразків сполук

Реферат англійською:

Research objects: mono- and polynuclear carboxylates of 3d metals, dibenzyl ether, cyclohexene, hydrogen peroxide, aerosils and crown-compounds. Aim of researches: establishment of conformities to law of formation and decomposition of products and intermediates of organic substrates at liquid-phase oxidation by air and hydrogen peroxide, catalyzed mono-, bi- and polynuclear complexes of 3d transitional metals. Research methods: kinetics, sorption, oscillation, electronic and NMR spectroscopy, mass-spectrometry, thin-layer and gas-liquid chromatography, potentiometry. Relationship between composition and structure more than 80 mono- and heteronuclear carboxylate complexes of 3d transitional metals of different structure which contain pivalate, 4,5-dimethylpyrazole, 4,5-di(trifluoromethyl)pyrazole, dipyridine, triflate and phenanthroline ligands, with their catalytic properties in decomposition of hydrogen peroxide, dibenzyl ether and cyclohexene oxidation by air and hydrogen peroxide is studied. The synthesis methods are worked out, a structure and properties of new polydent ligands - crown-ethers are studied. The crown-ethers complexes (CE) with potassium diperoxochlorochromate and chlorochromate, benzo- and 4'-bromobenzo-18-crown-6 complexes with HAuBr4 that isostructural to the analogous complexes of HAuCl4 are obtained. Kinetics of nCE·KCrO5Cl decomposition to the corresponding complexes of nCE·KCrO3Cl (n=1,2) is investigated. Orders and rates of initial complex decomposition are determined. The synthesis methods of: pyrimidines which contain -ketoimine fragment, ligands on the basis of 5-

nitrosopyrimidines and imidazol-4,5-dicarboxylic acid, isomeric N-oxides of 2-phenyl-1,2,3-triazoles, polyfunctioning N- containing ligands and biheteroaryl compounds on the basis of hydrazones and 2- -oxoalkylpyrimidines are developed and improved. On these methods more than 60 compounds samples are obtained.

Індекс УДК: 542.8:544.14;542.8:539.19, 547.098+542.943+547.26.265+547.7.8

Коди тематичних рубрик: 31.15.15

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: Кінетика розкладу пероксиду гідрогену, гідропероксиду циклогексену, рідиннофазного окиснення дибензилового етеру, що каталізуються більше 80 моно- і гетероядерними карбоксилатними комплексами 3d перехідних металів (Co, Ni, Cu, Zn) різної будови, що містять півалатні, піразолатні, 4,5-диметилпіразолатні, (4,5-трифторметил)-піразолатні, дипіридільні, трифлатні і фенантролинові ліганди. База даних про каталітичні властивості комплексів 3d металів в рідиннофазному окисненні дибензилового етеру і адекватні 2D QSPR PLS- моделі зв'язку структура-властивості. Методи синтезу лігандів на основі 5-нітрозопіримідинів та імідазол-4,5-дикарбонової кислоти; піримідинів, що містять -кетоімінний фрагмент; ізомерних N-оксидів 2-феніл-1,2,3-триазолів; бігетероарильних сполук на основі гідразонів та оксимів 2- -оксоалкілпіримідинів. Методи синтезу бензо- і 4'-бромбензо-18-краун-6, їх комплексів з бромисто- і хлористоводневою кислотами; [3.3]дибензо-18-краун-6 [1.5]дибензо-18-краун-6, цис-син-цис-дициклогексано-18-крау

Назва НТП англійською: Kinetics of hydrogen peroxide, cyclohexene hydroperoxide decomposition and dibenzyl ether liquid-phase oxidation, catalyzed more than by 80 mono- and heteronuclear carboxylate complexes of 3d transitional metals (Co, Ni, Cu, Zn) of different structure, which contain pivalate, 4,5-dimethylpyrazole, 4,5-di(trifluoromethyl)pyrazole, dipyridine, triflate and phenanthroline ligands. The database of the catalytic properties of 3d metals in the liquid-phase oxidation of dibenzyl ether by air oxygen. Adequate 2D QSPR PLS-model "Structure-property" with high predictive ability. The methods of ligands preparation which are based on 5-nitrosopyrimidines and imidazol-4,5-dicarboxylic acid; pyrimidines which contain -ketoimine fragment; isomeric N-oxides of 2-phenyl-1,2,3-triazoles; biheteroaryl compounds on the basis of hydrazones and 2- -oxoalkylpyrimidines. The preparation methods of benzo- and 4'-bromobenzo-18-crown-6, their complexes with hydrobromic and hydrochloric acids; [3.3]-dibenzo-18-crown-6, [1.5]-d

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Зіставлені каталітичні властивості моно- і гетероядерних (у т.ч. гетеролігандних) карбоксилатних комплексів 3d перехідних металів (більше 80) різної будови з їх каталітичними властивостями в розкладанні пероксиду водню, окисленні дибензилового етеру та циклогексену повітрям і пероксидом гідрогену. Побудовано адекватні 2D QSPR PLS-моделі зв'язку структура-властивість, що мають високу прогнозуючу здатність. Виявлено структурні чинники, що сприяють або перешкоджають прояву зазначених властивостей дослідженими металокомплексами. Розроблений спосіб отримання здатних до депротонування (4Z, 5E) піримідин- 2,4,5,6(1H, 3H) тетраон-4,5-диоксим і 5-нітрозо-6-фенілгідразино-урацил; спосіб отримання тіосемикарбазонів взаємодією тіосемікарбазиду з нітрозобарбитуровими кислотами в умовах кислотного каталізу; 2 -?-оксоалкилпіримідинів (70%) десульфуризацією продуктів алкилування 6-метил-тіоурацилу ?-бромкетонами; ізомерних N-оксидів 2-феніл-1,2,3-триазолів (до 70%) на основі 1- і 3-окси-2-феніл-1,2,3-триазол[4,5-d]піри

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:визначає НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства хімічної галузі

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

Нефедов С.Е., Кушан Е.В., Яковлева М.А., Чихичин Д.Г., Коцеруба В.А., Левченко О.А., Камалов Г.Л. Биядерные комплексы с геометрией "китайского фонарика" - интермедиаты жидкофазного окисления дибензилового эфира кислородом воздуха в присутствии карбоксилатов меди(II). Коорд. химия. - 2012.- Т. 38, № 3. - С. 233-240.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Іванов Ю.Е

Волошина Н.С.

Грищук Л.В.

Камалов Г.Л.

Коваль А.В.

Коцеруба В.А.

Кушнир К.П..

Левченко О.О

Плужник-Гладырь С.М.

Степанов Д.Є.

Чіхічін Д.Г.

Яволовський А.О.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

