Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U000819

Державний реєстраційний номер: 0116U004042

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-02-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Синтез молекулярних кліпс на основі бензокраун-етерів і здатних до передорганізації жорстких фрагментів. Вивчення впливу розміру циклів краун-етерів і природи зв'язуючої їх платформи на комплексоутворювання з органічними і неорганічними субстратами.

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

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: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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.): 1072.28

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез нових біс(бензокраун-етерів) і вивчення процесів утворення ними супрамолекулярних структур при взаємодії з неорганічними і органічними субстратами для створення нових матеріалів

Назва роботи англійською:

Synthesis of new bis(benzo crown ethers) and the study of the formation of supramolecular structures upon their interaction with inorganic and organic substrates for the development of new materials

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - Синтез, будова і комплексоутворююча здатність біс(бензокраун-етерів), що містять фрагменти основи Трьогера, як зв'язуючи краун-етерні цикли платформи. Методи дослідження - синтетичні, УФ, ЯМР спектроскопія, мас-спектрометрія, РСА. Оптимізовано метод синтезу і отримані з виходами 70-88% основи Трьогера, які містять фрагменти бензо-15-краун-5, бензо-18-краун-6, бензо-21-краун-7 і тетрафтордибензо-18-краун-6. Вивчено комплексоутворення отриманих молекулярних пінцетів з катіонами лужних металів і солями аліфатичних діамінів. Отримані константи стійкості комплексів, які утворюються, показали, що стійкість комплексів 1:1 раніше отриманих молекулярних кліпс з фрагментом дифенілглікольурила з катіонами лужних металів вище, ніж для основ Трьогера, однак загальні тенденції комплексоутворення зберігаються. Серед отриманих основ Трьогера найбільш стійкі комплекси з солями діамінів утворює молекулярний пінцет з фрагментом бензо-18-краун-6, максимальне зв'язування спостерігаються для комплексу з дигідрохлоридом гексаметилендіаміна і поступово знижується зі зменшенням довжини метиленового ланцюга. Зроблено висновок про те, що фрагмент основи Трьогера значно менше передорганізован для утворення комплексів, ніж фрагмент дифенілглікольурила.

Реферат англійською:

Research object - Synthesis, structure and complex formation ability of bis(benzocrown ethers) containing Tr?ger's base fragments as linking crown-ether cycles platform. A purpose of work is synthesis of bis(benzocrown ethers) containing Tr?ger's base fragments as linking crown-ether cycles platform, the study of their complexation with alkali metal cations and salts of aliphatic diamines. Comparison of the complexing properties of bis(benzocrown ethers) with the fragments of diphenylglycoluril and Tr?ger's base. Research methods - synthetic, UV, NMR spectroscopy, mass spectrometry. The synthesis method was optimized and Tr?ger's bases, containing fragments of benzo-15-crown-5, benzo-18-crown-6, benzo-21-crown-7, and tetrafluorobibenzo-18-crown-6 were obtained with yields of 70-88%. The complexation of the obtained molecular tweezers with alkali metal cations and salts of aliphatic diamines was studied. The obtained stability constants of the formed complexes showed that the stability of the 1:1 complexes of the previously obtained molecular clips with a diphenylglycoluryl fragment with alkali metal cations is higher than for Tr?ger's bases, but the general tendencies of complexation remain. Among the Tr?ger's bases obtained, the most stable complexes with diamine salts form molecular tweezer with a benzo-18-crown-6 fragment, maximum binding is observed for the complex with hexamethylenediamine dihydrochloride and gradually decreases with decreasing length of the methylene chain. It is concluded that the fragment of the Tr?ger's base is much less pre-organized for the formation of complexes than the diphenylglycoluryl fragment.

Індекс УДК: 547.8, 547.898

Коди тематичних рубрик: 31.21.27.07

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: Метод синтезу біс(бензокраун-етерів), які містять фрагменти основи Трьогера, і вивчення їх комплексоутворення з катіонами металів і солями аліфатичних діамінів.

Назва НТП англійською: The method of synthesis of bis (benzocrown ethers) containing Tr?ger's base fragments, and the study of their complexation with metal cations and aliphatic diamines salts.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Дослідження та розробки в галузі хімії

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Використовуючи в якості модельної сполуки п-анізидин, відпрацьовані умови отримання основ Трьогера і показано, що оптимальним є використання трифлуорооцтової кислоти як каталізатор і розчинник, а в якості метиленової складової параформа. У цих умовах з виходами 70-88% отримані основи Трьогера, що містять фрагменти бензо-15-краун-5, бензо-18-краун-6 і бензо-21-краун-7. Аналогічно з виходом 77% було отримано основу Трьогера на основі дибензокраун-етеру, що містить по 4 атома Флуору в термінальних бензольних кільцях. Показано, що отримані сполуки утворюють з катіонами лужних металів та солями аліфатичних діамінів сендвічеві комплекси складу 1:1.

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. Kikot L.S., Kulygina C.Yu., Lyapunov A.Yu., Shishkina S.V., Zubatyuk R.I., Bogashchenko T.Yu., Kirichenko T.I. Synthesis and complexation of molecular clips based on diphenylglycoluril and dibenzocrown ethers with alkali metal cations and paraquat. Tetrahedron. - 2018. - Vol. 74, №39. - P. 5725-5732. 2. Kikot' L.S., Kulygina C.Yu., Lyapunov A.Yu., Shishkina S.V., Zubatyuk R.I., Bogaschenko T.Yu., Kirichenko T.I. Synthesis and Complexation Properties of Molecular Clips Based on Diphenylglycoluril with Crown Ether Moieties. 10th International symposium on Nano and Supramolecular Chemistry, Dresden, Germany, 09-12, July 2018. Abstracts. - P-A8. 3. Kikot L.S, Loskutova Yu.O, Kulygina C.Yu., Basok S.S, Lyapunov A.Yu, Bogaschenko T.Yu., Kirichenko T.I. Synthesis and complexation properties molecular tweezers based on Tr?ger's base and crown ethers with alkali metal cations and diamine hydrochlorides. 8th International Conference "Chemistry of Nitrogen Containing Heterocycles", Харків, 12-16 листопада 2018 р. Abstracts. - P. 98. 4. Lyapunov A.Yu., Kikot L.S., Kulygina C.Yu., Shishkina S.V., Kirichenko T.I. Crown-containing molecular clips with imidazole core: synthesis and structure. 8th International Conference "Chemistry of Nitrogen Containing Heterocycles", Харків, 12-16 листопада 2018 р. Abstracts. - P. 99.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Богащенко Т.Ю.

Кириченко Т.І.

Кулигіна К.Ю.

Кікоть Л.С.

Ляпунов О.Ю.

Яковенко І.С.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

