Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0215U008504

Державний реєстраційний номер: 0110U004995

Відкрита

Дата реєстрації: 28-12-2015

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Електронна та просторова будова нових сполук з особливими функціональними властивостями. Комплексне дослідження за допомогою сучасних фізико-хімічних методів.

Початок етапу: 01-2011

Закінчення етапу: 12-2015

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут органічної хімії НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Підпорядкованість: Президія Національної академії наук України

Адреса: 02660, Київ-94,вул.Мурманська,5

Телефон: 292-71-50

Телефон: 573-26-43

E-mail: ioch@ioch.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут органічної хімії НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Адреса: вул.Мурманська,5, м. Київ, Київська обл., 02660, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380444994613

E-mail: ioch@ioch.kiev.ua

WWW: http://ioch.kiev.ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 6541030

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 4089.51 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Електронна та просторова будова нових сполук з особливими функціональними властивостями. Комплексне дослідження за допомогою сучасних фізико-хімічних методів.

Назва роботи (англ)

Electronic and spatial structure of the new compounds with peculiar functional properties. Complex investigation with modern physical-chemical methods.

Реферат (укр)

Мета даного комплексного проекту полягає в застосуванні сучасних фізико-хімічних (спектроскопія ЯМР, рентгеноструктурний метод, високоефективна рідинна хроматографія) та теоретичних підходів для дослідження особливостей електронної, молекулярної та кристалічної будови широкого ряду нових хімічних сполук. Об'єктами дослідження є нові органічні та елементоорганічні сполуки, перспективні для молекулярного дизайну, кристалічної інженерії функціональних матеріалів та хімічного каталізу. Знайдено, що в кристалічному стані аналоги віологенів проявляють люмінесценцію, яка залежить не тільки від молекулярної будови сполук, але й від способу організації молекул в кристалі, наявності пі-стекінгу між компонентами, сольватоватації молекулами розчинника та водневих зв'язків в кристалі. Досліджені ряд механізмів хімічних реакцій за участю карбенів, у тому числі фторованих, N-фосфанільованих, ациклічних та гетероциклічних. Методами спектроскопії ЯМР, квантової хімії та ренгеноструктурними дослідженнями монокристалів вивчено будову і конформаційні властивості електрофільних та нуклеофільних, циклохіральних та внутрішньо хіральних каліксаренів та структурно подібних сполук, а також їх аддуктів з органічними, елементорганічними та біологічно важливими молекулами-гостями. Наукові дослідження, виконані за даним проектом, відповідають сучасному міжнародному рівню і не мають аналогів в Україні.

Реферат (англ)

The main aim of the current comprehensive project includes an implementation of modern physico-chemical methods (NMR spectroscopy, X-ray diffraction, highly effective liquid chromatography) and theoretical approaches for studying peculiarities of electronic, molecular and crystal structure of the large series of new chemical compounds. The objects studied are new organic and organoelement compounds, which are prospective for molecular design, crystal engineering of the functional materials, and chemical catalysis. It has been found that in the solid state viologene analogues possess luminescence, which depends not only on the molecular structure of these species, but also on their molecular organization in crystal, presenting pi-stacking between components, solvatation by solvent molecules and hydrogen bonding in crystal. Several reaction mechanisms have been elucidated with a participation of carbenes, including fluor- and phosphorus-containing, N-phosphanylated, acyclic and heterocyclic ones. By NMR spectroscopy and quantum chemistry and single-crystal X-ray diffraction methods structure and conformational properties have been investigated for the electrophilic and nucleophilic, cyclochiral and internally chiral calixarenes and structurally similar species and their adducts with organic, organoelement and biologically important guest molecules. The investigation carried out within this project meet the current international level and do not have analogs in Ukraine.

Індекс УДК: 547:544.18;547:544.16;547:544.12, 547.1:(548.737+544.18+543.429.23)

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.15

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Електронна та просторова будова нових сполук з особливими функціональними властивостями.

Комплексне дослідження за допомогою сучасних фізико-хімічних методів.

Назва продукції (англ): Electronic and spatial structure of the new compounds with peculiar functional properties. Complex investigation with modern physical-chemical methods.

Очікувані результати:

Галузь застосування: 73.10.1

Опис продукції (укр): Знайдено, що в твердому стані аналоги віологенів проявляють люмінесценцію, яка залежить не тільки від молекулярної будови сполук, але й від способу організації сполук в кристалі, ?-стекінгу між компонентами в кристалі або наявності сольватних молекул розчинників та водневих зв'язків в кристалі.Показано, що найбільш імовірним механізмом перегрупування N-фосфанільованих ациклічних та гетероциклічних карбенів є внутрішньомолекулярний через трицентровий перехідний стан. Аміно-заміщення при атомі фосфору та збільшення нуклеофільності гетероциклу сприяють міграції. Методами мультиядерної та динамічної спектроскопії ЯМР вивчено структуру та конформаційну стабільність фосфорвмісних імінів. Методами спектроскопії ЯМР, квантової хімії та ренгеноструктурними дослідженнями вивчено будову і конформаційні властивості внутрішньо хіральних каліксаренів з АВСН-типом заміщення.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: -

Виробник продукції: ІОХ НАН України

Споживачі продукції: синтетична хімія

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: Тема НДР має фундаментальний теоретичний характер

Форми та умови передачі продукції: Продаж продукції

7. Бібліографічний опис

Tarasevych A., Shevchenko I., Rozhenko A.B., Roeschenthaler G.-V. Synthesis of 1,3-diphospha-2,3-dihydro-1H-phenalenes// Eur. J. Inorg. Chem., 2010, Iss. 10, p. 1552-1558; Y. M. Poronik,V.P.Yakubovskyi, M.P.Shandura, Y.G.Vlasenko, A.N.Chernega, Y.P.Kovtun. 3,5-Bis(benzothuazolyl)-Substituted BODIPY Dyes.// Eur.J.Org.Chem., 2010, p.2746-2752; A.V. Gutov, E.B.Rusanov, A.B.Ryabitskii, A.N.Chernega// Octafluoro-4,4'-bipyridine and its derivatives: synthesys, molecular and crystal structure. Journal of Fluorine Chemistry. 2010, 131 (2), p.278 -281; V.M. Timoshenko, S.A. Siry, A.B. Rozhenko, Yu.G.Shermolovich. Asymmetric induction in the thia-Diels-Alder reactions of chiral polyfluoroalkylthionocarboxylates. J. Fluor. Chem.2010, 131, p. 172-183; O.V.Gutov, E.B.Rusanov, A.A.Kudryavtsev, S.G.Garasevich, O.V.Slobodyanyuk, V.M.Yashhuk, A.N.Chernega.Luminescence induced by strong cation-anion pi-pi Interactions in crystals of viologen analogues.// Cryst. Eng. Comm. 2011, V. 13, 5, p. 1373-1377; K.V. Turcheniuk,A.B. Rozhenko, I.V. Shevchenko/ Synthesis and Some Chemical Properties of a 1,2-?3?3-Thiaphosphiran.//Eur.J.Inorg.Chem.2011,p.254-258; A. Marchenko, H. Koidan, A. Hurieva, A. Merkulov, A. Pinchuk, A. Yurchenko, A.B. Rozhenko, P.G. Jones, H. Th?nnessen, A. Kostyuk. Cyclization of C-phosphorylated (PIII) arylformamidines to 3H-1,3-benzazaphospholes// Tetrahedron, 2011, v.67, p.7748-7758; T. Westermann, R. Brodbeck, A.B. Rozhenko, W.W. Schoeller,U. Manthe. Photodissociation of methyl iodide embedded in host-guest complex: a full dimensional (189D) quantum dynamics study of CH3I@resorc[4]arene.// J. Chem. Phys. 2011, vol. 135, p.184-192; K.V. Turcheniuk,A.B. Rozhenko. Asymmetric synthesis of phosphonotrifluoroalanine and its derivatives using N-tert-butanesulfinyl imine derived from fluor.// J. Comp. Chem.,2012, v. 33, p.1023-1028; O. Kalchenko, S. Cherenok, O. Yushchenko, V. Kalchenko. Complexation of calix[4]arene-hydroxymethylphosphonic acids with amino acids. Binding constants determination of the complexes by HPLC method// J. Incl. Phenom. 2012. - DOI 10.1007/s10847-012-0169-x; A.P.Avdeenko, S.A.Konovalov, O.N.Mikhailichenko, V.Shelyazhenko, V.V.Pirozenko, L.M.Yagupol'ski Reaction of N-aryl(methyl,trifluoromethyl)sulfonyl-1,4-benzoquinone Monoimines with Sodium Sulfinates// Russ. J. Org. Chem. 2012, V. 48, P.221-244; R?schenthaler G.-V., Kukhar V.P., Kulik I.B., Belik M.Y., Sorochinsky A.E., Rusanov E.B., Soloshonok V.A. Asymmetric synthesis of phosphonotrifluoroalanine and its derivatives using N-tert-butanesulfinyl imine derived from fluor.// Tetrahedron Lett. 2012, V53, 5, p. 539-542; A.G. Yaremenko, V.V. Shelyakin, D.M. Volochnyuk, E.B. Rusanov, O.O. Grygorenko. An approach to dihydroiso-indolobenzodiazepinones - Three-dimensional molecular frameworks // Tetrahedron Lett. 2013, vol. 54, 10, p. 1195-1197 ; A.B. Rozhenko, W.W. Schoeller, M.C. Letzel, B. Decker, J. Mattay. Anion- Interactions in Adducts of Anionic Guests with Octahydroxy-pyridine[4]arene: Theoretical and Experimental

Study.// New J. Chem., 2013, v. 37, p. 356-365; O.M. Nazarenko E.B. Rusanov, A.N. Chernega, K.V. Domasevitch.// Acta Cryst. Sec. C. 2013, vol. 69 (3), p. 232-236 ; A.P. Gudz, A.S. Kanishchev, Y.G. Vlasenko, A.N. Chernega, Y.G. Shermolovich. Investigation of the Chlorination of 4-(Perfluoroalkyl)-5-(p- toluenesulfonyl)uracils. Synthesis of 5-Chloro-6-(perfluoroalkyl)-5-(p-toluenesulfonyl)pyrimidine-2,4(3H,5H)-diones// Chemistry of Heterocyclic Compounds, 2013, Vol.49, Issue 4, 591-597; A.B. Rozhenko, W.W. Schoeller, J. Leszczynski. On the stability of perfluoroalkyl-substituted singlet carbenes: a coupled-cluster quantum chemical study.// J. Phys. Chem. A, 2014, v. 118, 8, p. 1479-1488; A.B. Rozhenko, S.S.Mykhaylychenko, N.V. Pikun, Yu.G. Shermolovich, J. Leszczynski. Intermediate carbene formation in the reaction of thioamides with phosphorus (III) derivatives: quantum chemical investigation.// Int. J. Quant. Chem., 2014, v. 114, p. 241-248; O.I. Kalchenko, S.O. Cherenok, A.V. Solovyov, V.I. Kalchenko, V. V. Gorbatchuk. Study of the Complexation of 5,17-Bis-(N-tolyliminomethyl)-25,27-dipropoxycalix[4]arene with Pyridine Carboxylic Acids by RP HPLC and Molecular Modeling.// Supramolecular Chemistry, 2014, V. 26, P. 409-413; P.P. Onys'ko, D.V. Klukovsky, A.V. Bezdudny, V.V. Pirozhenko, Y.M. Pustovit, A.D. Synytsya. N-(R-Cyclopropyl)Trifluoroacetimidoyl Phosphonates// Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements, 2014, V. 189, N. 7-8, P.1094-1101; A.B. Rozhenko. Density Functional Theory Calculations of Enzyme-Inhibitor Interactions in Medicinal Chemistry and Drug Design.// In: Application of Computational Techniques in Pharmacy and Medicine. L. Gorb et al. (eds.), Springer, Dordrecht 2014, vol 17, p. 207-240; V. D. Dyachenko, A. N. Toropov, E. B. Rusanov/ Revision of 2-(3,8-diaryl-6-oxo-2,7-diazaspiro[4.4]nona-2,8-dien-1-ylidene)malononitrile structure. molecular and crystal structure of 3-cyano-2-[2-(4-methoxyphenyl)-2-oxoethyl]-2-[5-(4-methoxyphenyl)-1н-pyrrol-2-yl]malononitrile// Chem. Heterocycl. Compd. 2015. Vol. 51, No. 1.p. 31-33; V. V Ponomarova, J. A. Rusanova, E. B. Rusanov, K. V Domasevitch. Unusual centrosymmetric structure of [m(18-crown-6)](+) (m = rb, cs and nh4) complexes stabilized in an environment of hexachloridoantimonate(v) anions //Acta Crystallogr. Sect. C, Struct. Chem. 2015. Vol.71, No. Pt 10.p. 867-72; A.A. Kirilchuk, A.A. Yurchenko, A.N. Kostyuk. 1,2-Migration in N-phosphorylated N-heterocyclic carbenes.// J. Comput. Chem. 2015, 36, p. 42-48; A.K. Polischuk, O.A. Yesypenko, A.B. Rozhenko, V.V. Pirozhenko, Y.A. Salimov, V.V. Ischenko, V.I. Boyko, V.P. Khilya, V.I. Kalchenko. Stereoselective synthesis of six stereoisomers of inherently chiral methoxy-propoxy-butoxy-methoxycarbonylmethoxy-tert-butylcalix[4]arene. // Tetrahedron Lett., 2015, 56, 33, p. 4788-4791

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 274

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Власенко Юрій Геннадійович

Кальченко Ольга Іванівна

Кирильчук Андрій Анатолійович

Кузнецова Наталія Йосипівна

Пироженко Володимир Валентинович

Роженко Олександр Борисович

Романіка Тетяна Олексіївна

Русанов Едуард Борисович

Саава Лейла Луківна

Смертенко Олена Аронівна

Фалківська Вікторія Володимирівна

Чернега Олександр Миколайович

Шафранова Валентина Савватіївна

Керівник організації:

Кальченко Віталій Іванович

Керівники роботи:

Поволоцький Марко Йосипович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.