Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0217U003098

Державний реєстраційний номер: 0115U003537

Відкрита

Дата реєстрації: 18-01-2017

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Синтез нових типів карбенів з розгалуженими ароматичними ядрами. Вивчення каталізу карбеновими комплексами металів реакцій відновлення кетонів, галогенаренів, оксидації спиртів

Початок етапу: 01-2016

Закінчення етапу: 12-2016

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05420735

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 02160, Київ -160, вул. Харківське шосе, 50

Телефон: 5596675

Телефон: 5596686

E-mail: office.ipocc@nas.gov.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім.Л.М.Литвиненка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05420735

Адреса: Харківське шосе, 50, м. Київ, Київська обл., 02160, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445596675

Телефон: 380445596686

E-mail: office.ipocc@nas.gov.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: 640.3 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Стабільні карбени нового покоління та їх похідні. Синтез і властивості

Назва роботи (англ)

Stable carbenes of a new generation. Synthesis and properties

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження. Нові типи стабільних карбенів на основі конденсованих імідазол-2-іліденів та їх прекарбенові та карбеноїдні форми для створення високоефективних каталізаторів органічних реакцій у гомогенних та гетерогенних процесах. Мета роботи – синтез стабільних карбенів нового покоління для їх використання в якості каталізаторів органічних реакцій – гідродегалогенування гало-генаренів, відновлення кратних зв'язків, трансестерифікації тощо. Методи дослідження - синтетичний, спектральні (ЯМР спектроскопія), аналітичні (хроматографічний, елементний аналіз), рентгеноструктурний аналіз. Результати НДР : Розроблено синтез стерично екранованих та стерично відкритих похідних фенантро[9,10-d]імідазол-2-іліденів з адамантильними, метильними та 2,6-діізопропіл¬фенільними замісниками, вихо¬дя¬чи від фенантренхінону. Метильні похідні карбеноїдів синтезовано шляхом реакції фенентренхінону з ацетатом амонію та формальдегідом з наступним метилюванням отриманого фенантро[9,10-d]імідазолу диметилкарбонатом в присутності DABCO, метилюванням проміжного 1-метилфенантро[9,10-d]імідазолу метилйодидом та генерацією 1-метилфенантро[9,10-d]імідазол-2-ілідену дією на відповідну карбеноїдну сіль трет-бутоксидом натрію в присутності йодиду міді. Адамантилювання фенантро[9,10-d]імідазолу вели в о-дихлорбензені в присутності гідриду кальцію. Отримано монозаміщену та 1,3-дизаміщену похідні цієї системи. Розроблено синтез циклічних карбенових комплексів на основі бензімідазол-2-іліденів та йодиду міді(I) та знайдено високоефективний каталіз ними реакції відновлення кетонів спиртами в лужному середовищі. Методом DFT проведено розрахунки синглет-триплетних розщеплень великої кількості карбенів та визначено найстабільніші з них. Отримані дані мають значення для розвитку препаративного синтезу стабільних карбенів, прекарбенів та їх похідних, каталізу органічних реакцій за допомогою вказаних сполук. Галузь застосування – синтез стабільних карбенів та їх похідних, каталіз органічних реакцій.

Реферат (англ)

The object of the study is new types of stable carbenes on the basis of fused imidazol-2-ylidenes and their precarbene and carbenoid forms to obtain highly effective catalysts of organic reactions in homogenic and heterogenic processes. The goal of the work is synthesis of stable carbenes of new generation for using as catalysts of organic reactions (hydrodehalogenation of haloarenes, reduction of multiple bonds, transesterification, etc. Methods of the study are synthetic, spectroscopic (NMR spectroscopy), analytical (chromatography, elemental analysis), X-ray ana¬lysis. The results of the research involve synthesis of sterically shielded and sterically open derivatives of phenanthro[9,10-d]imidazol-2-ylidenes with adamantyl, methyl and 2,6-diisopropylphenyl substitutents starting from phenathrenequinone. Methyl derivatives of carbenoids were synthesized by the reaction of phenathrenequinone with ammonium acetate and formaldehyde followed by the subsequent methylation of the obtained phenanthro[9,10-d]imidazole with dimethyl carbonate in the presence of DABCO, methylation of the intermediate 1-methylphenanthro[9,10-d]imidazole with methyl iodide and generation of 1,3-dimethylphenanthro[9,10-d]imidazol-2-ylidene under the action of sodium tert-butoxide on the corresponding salt in the presence of copper iodide. Adamantylation of phenanthro[9,10-d]imidazole was carried out in dichlorobenzene in the presence of calcium hydride. Mono- and disubstituted derivatives of this system were prepared. Synthesis of benzimidazol-2-ylidene-based cyclic carbene complexes with copper(I) iodide was developed and highly efficient catalysis was observed for the reduction reaction of ketones by alcohols in alkali medium. The DFT calculations of singlet-triplet splittings were carried out for a series of carbenes and the most stable ones were defined. The resulting data have prospects for the development of preparative synthesis of stable carbenes, precarbenes and their derivatives, catalysis of organic reactions with the help of the indicated compounds. The area of the application is synthesis of stable carbenes and their derivatives, catalysis of organic reactions.

Індекс УДК: 547, 547.78+547.79

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.01

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Методи синтезу нових типів карбенів на основі імідазол-2-іліденів, конденсованих аналогів та їх комплексів з перехідними металами.

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

Очікувані результати:

Галузь застосування: 72.19 - Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Опис продукції (укр): Вперше розроблено методи синтезу конденсованих карбенів та їх комплексів з перехідними металами на основі системи фенантро[9,10-d]імідазол-2-ілідену з метильними, адамантильними та 2,6-діізопропілфенільними замісниками, виходячи з фенантренхінону, циклічних комплексів на основі бензімідазол-2-іліденів та йодиду міді(I). Знайдено високий каталітичний ефект останніх у реакції відновлення кетонів ізопропанолом в присутності гідроксиду калію. Отримані карбени та їх комплекси є переспективними каталізаторами реакцій трансестерифікації та гідродегалогенування галоаренів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: Не визначалися

Виробник продукції: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненека НАН України

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

Перспективні ринки: Не визначалися

Права інтелектуальної власності: Отримано патент

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1.Патент № 112395 (Україна). C07D 233/00. Карбенові комплекси паладію / М.І.Короткіх, В.Ш.Сабєров, А.Ф.Попов, О.П.Швайка. – Заявл. 17.09.2015 (№ u 2012 10042).– Опубл. 25.08.2016. Бюл. №16. 2. Швайка Ол., Короткіх М. Методи синтезу органічних речовин: навчальний посібник. Вінниця: ДонНУ, 2016.– 296 с.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 42

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік організацій-співвиконавців

Назва організації: Інститут органічної хімії НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

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

Підпорядкованість:

Перелік осіб-виконавців

Єня Василь Іванович

Дзюба Оксана Іванівна

Ковач Микола Анатолійович

Короткіх Владислав Миколайович

Короткіх Микола Іванович

Панкіна Ольга Юрієвна

Раєнко Генадій Федорович

Скоробогатова Зоя Михайлівна

Ткачук Юлія Валентинівна

Устілко Юлія Олександрівна

Швайка Олесь Павлович

Керівник організації:

Попов Анатолій Федорович

Керівники роботи:

Короткіх Микола Іванович (д. х. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.