Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0216U001338

Державний реєстраційний номер: 0114U003224

Відкрита

Дата реєстрації: 05-02-2016

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: ІТК реакції конденсації хлорангідридів карбонових кислот з фенолами

Початок етапу: 01-2015

Закінчення етапу: 12-2015

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: 5596686

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: 1361.7 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Інверсійний трансфазний каталіз реакцій конденсації біфункціональних хлорангідридів і фенолів

Назва роботи (англ)

Inverse transphase catalysis of condensation reactions of bifunctional chloro anhydrides and phenols

Реферат (укр)

Об'єкти дослідження - бензоїлхлорид, феноли, дифеноли, N-оксиди піридину, імінопохідні госсипола. Мета роботи - розробка методів конденсації хлорангідридів карбонових кислот з фенолами і дифенолами в двофазних системах вода-органічний розчинник в присутності піридин-N-оксидів, вивчення впливу структури каталізатора на швидкість реакції і вихід продукту - відповідного естеру, визначення найефективнішого каталізатору і оптимізація умов проведення синтезу естерів, дослідження будови та фізико-хімічних властивостей отриманих сполук. Методи дослідження - ІЧ спектроскопія, ядерний магнітний резонанс, елементний аналіз, квантово-хімічні розрахунки. Вивчено інверсійний трансфазний каталіз (ІТК) реакцій бензоїлювання фенолів. Показано, що використання методу ІТК дозволяє проводити реакцію бензоїлювання монофенолів і дифенолів в м'яких умовах. Встановлено вплив початкової концентрації каталізатора у водній фазі на швидкість процесу і вихід продукту реакції. Визначено, що найбільш ефективним каталізатором серед випробуваних для проведення реакції бензоїлювання є 4-метоксипіридин-N-оксид. Методами ІЧ-, ЯМР-спектроскопії та DFT вивчено будову шістьох естерів - 4-нітрофенілбензоату, 4-ціанофенілбензоату, 2-форміл-3,5-діметоксифенілбензоату, 2-метилхінолін-4-ол-бензоату, п-фенілендібензоату, м-фенілендібензоату, нафтален-2,3-діол-дібензоату. Синтезовані нові іміно-похідні госсиполу. Методами ЯМР та ІЧ спектроскопії досліджено їх будову і таутомерні рівноваги. Новизна роботи полягає в розробці простих екологічно безпечних методів бензоїлювання фенолів. Наукова значимість визначається вивченням механізму процесу і структури продуктів реакції сучасними методами експериментальної і теоретичної спектроскопії. Практичне значення полягає в находженні ефективних антиоксидантів з природної відновлюваної сировини. Проведення органічних реакцій в водно-органічних системах суттєво знижує використання органічних розчинників, що важливо як з екологічних, так і технологічних міркувань. Проведені дослідження необхідні для подальшого розвитку теорії ІТК реакцій біфункціональних реагентів, встановлення механізму їх трансфазних перетворень, розробки способів застосування ІТК для синтезу естерів.

Реферат (англ)

Objects of research - benzoyilhloryd, phenols, diphenols, pyridine N-oxides, gossypol imine-derivatives. Purpose - to develop methods of condensation of carboxylic acids chlorides with phenols and diphenols in two-phase systems water-organic solvent with the presence of pyridine N-oxides, the catalyst influence on reaction rate and yield study, the most effective catalyst determination and conditions of esters synthesis optimization. Physico-chemical properties and structure obtained compounds studying. Research methods - infrared spectroscopy, nuclear magnetic resonance, elemental analysis, quantum-chemical calculations. Were studied inverse phase transfer catalysis (CTI) reactions of phenols benzoylation. It is shown that use of CTI allows monophenols and diphenols benzoylation reaction make under mild conditions. The influence of the initial concentration of the catalyst in aqueous phase on the rate of reaction and product yeld was found. It was found that the most efficient catalyst among subjects for benzoylation reactionis 4-dimethylaminopyridine-N-oxide. The structure of six ethers: -4-nitrophenylbenzoate, 4- cyanophenylbenzoate, 2 formil-3,5-dimethoxyphenylbenzoate, 2-methylhinolin-4-olbenzoate, p-phenylenedybenzoate, m-phenylenedybenzoate, naphthalene-2,3-dioldybenzoate. The new gossypol imine derivatives were synthesized. The structure and tautomeric equilibrium by methods IR and NMR spectroscopy were studied. The novelty of the work is in developing simple environmentally sound methods phenols benzoylation.

Індекс УДК: 544.47, 544.47 + 547-32 + 547.56

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.15.27.07

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Методи бензоїлювання фенолів в умовах інверсійного трансфазного каталізу

Назва продукції (англ): Phenols benzoylation methods in conditions of inverse phase transfer catalysis

Очікувані результати:

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

Опис продукції (укр): Запропоновано методику бензоїлювання фенолів і дифенолів в умовах інверсійного трансфазного каталізу. Показано, що використання методу ІТК дозволяє проводити реакцію бензоїлювання фенолів і дифенолів в м'яких умовах. Встановлено вплив початкової концентрації каталізатора у водній фазі на швидкість процесу і вихід продукту реакції. Визначено, що найбільш ефективним каталізатором серед випробуваних для проведення реакції бензоїлювання є 4-диметиламінопіридин-N-оксид.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: Не визначено

Виробник продукції: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка

Споживачі продукції: Хімічна промисловість

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: Публікації, доповіді на наукових конференціях

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. Изучение антирадикальной активности диаминов госсипола. [Текст] / А. М. Дикун [и др.] // Сборник докладов 5-й Международной научной конференции "Химическая термодинамика и кинетика", г. Великий Новгород, 25 - 29 мая 2015 г. - Великий Новгород, 2015. - С. 63 - 65. 2. Квантово-химическое моделирование реакции хлордифенилфосфата с производными пиридин-N-оксида. [Текст] / В. Н. Аниенко [и др.] // Сборник докладов 5-й Международной научной конференции "Химическая термодинамика и кинетика", г. Великий Новгород, 25 - 29 мая 2015 г. - Великий Новгород, 2015. - С. 11 - 12.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 38

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік організацій-співвиконавців

Назва організації: Інститут хімії поверхні ім.О.О. Чуйка НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03291669

Адреса: 03164, Київ-164, вул. Генерала Наумова, 17

Підпорядкованість:

Перелік осіб-виконавців

Єфімова Ірина Владиславівна

Аніщенко Віктор Миколайович

Волкова Лариса Костянтинівна

Гребенюк Людмила Володимирівна

Дикун Олексій Михайлович

Кирильчук Андрій Анатолійович

Кравченко Віктор Васильович

Кравченко Галина Григорівна

Кузнєцова Наталія Йосипівна

Кучеренко Володимир Олександрович

Пироженко Володимир Валентинович

Поволоцький Марк Йосипович

Редько Андрій Миколайович

Рибаченко Володимир Іванович

Романіка Тетяна Олексіївна

Русанов Едуард Борисович

Саава Лейла Луківна

Смертенко Олена Аронівна

Тамаркіна Юлія Володимирівна

Фалківська Вікторія Володимирівна

Фролова Ірина Борисівна

Чернишова Марина Іванівна

Чотій Костянтин Юрійович

Шафранова Валентина Савватіївна

Шендрик Тетяна Георгіївна

Шологон Віктор Іванович

Керівник організації:

Попов Анатолій Федорович

Керівники роботи:

Рибаченко Володимир Іванович (д. х. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.