Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0221U100671

Державний реєстраційний номер: 0119U002035

Відкрита

Дата реєстрації: 08-01-2021

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез нових біс(бензокраун-етерів) з різною природою зв'язуючої цикли платформи, виходячи з краунвмістних бензилів. Вивчення впливу розміру циклів краун-етерів і природи зв'язуючої їх платформи на комплексоутворювання з різними субстратами. Оцінка перспективності використання синтезованих сполук в якості хемосенсорів.

Початок етапу: 01-2019

Закінчення етапу: 12-2020

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03534535

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Телефон: 380487662044

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

WWW: https://physchem.od.ua/

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03534535

Адреса: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380487662044

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

WWW: https://physchem.od.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: 2176.383 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Біс(краун-етери) з фоточутливими або здатними до передорганізації жорсткими лінкерами: синтез, структура і вивчення комплексоутворення з катіонами металів і органічними субстратами для пошуку нових хемосенсорів.

Назва роботи (англ)

Bis(crown ethers) with photosensitive or rigid linkers capable to pre-organization: synthesis, structure and study of complexation with metal cations and organic substrates to search a new chemosensors

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження – Синтез, структура та комплексоутворюючі властивості біс(бензокраун-етерів), що містять фрагменти хіноксаліну або глікольурилу, які зв’язують краун-етерні цикли. Мета роботы – синтез біс(бензокраун-етерів), що містять фрагменти хіноксаліну або глікольурилу, які зв’язують краун-етерні цикли, виходячи з краунвмістних бензилів, вивчення їх структури і комплексоутворення з катіонами лужних металів. Кип'ятінням краунвмістних бензилів з о-фенілендіамінами в етанолі в присутності ПТСК з виходами 63–89% отримані біс(бензокраун-етери), що містять фрагменти хіноксаліну в якості зв'язуючого лінкеру. Показано, що в спектрах флуоресценції при додаванні катіонів лужних металів до розчинів біс(краун-етерів) з незаміщеним хіноксаліновим фрагментом спостерігається значне підвищення інтенсивності флуоресценції (до 5 разів). Методами спектрофотометричного і флуоресцентного титрування показано, що отримані краунвмістні хіноксаліни утворюють з катіонами лужних металів комплекси складу 1:1. У деяких випадках з катіонами калію і натрію спостерігаються також комплекси складу 1:2 (L:M) зі значно меншою константою стійкості. Сполуки з 15-членними краун-етерними циклами найбільш стійкі комплекси сендвічного типу утворюють з катіонами рубідію і калію, а 18-членні – з катіоном цезію. Виявлено речовини, які є перспективними як хемосенсори для визначення катіонів цезію і калію у присутності великих надлишків катіонів натрію. Кип'ятінням протягом 2-3 тижнів з насадкою Діна-Старка для видалення води краунвмістних бензилів з сечовиною в бензолі або толуолі в присутності трифлуорооцтової кислоти як каталізатора з виходом ≥ 70% отримані біс(бензокраун-етери) з фрагментами глікольурилу. Метилюванням отриманих сполук йодистим метилом в ДМФА в присутності гідриду натрію введені метильні групи по атомах Нітрогену глікольурильного фрагмента.

Реферат (англ)

The object of research – synthesis, structure and complexing properties of bis(benzocrown ethers) containing quinoxaline or glycoluril fragments that bind crown ether cycles. The aim of this work – synthesis of bis (benzocrown ethers) containing quinoxaline or glycoluryl fragments that bind crown ether cycles based on crown-containing benzyl, study their structure and complexation with alkali metal cations. By boiling crown-containing benzyl with o-phenylenediamines in ethanol in the presence of PTSA with yields of 63–89%, bis(benzocrown ethers) containing quinoxaline fragments as a binding linker were obtained. It is shown that in the fluorescence spectra when alkali metal cations are added to solutions of bis(crown ethers) with an unsubstituted quinoxaline fragment, a significant increase in the fluorescence intensity (up to 5 times) is observed. By the methods of spectrophotometric and fluorescent titration were shown that the obtained crown-containing quinoxalines form with alkali metal cations complexes of composition 1:1. In some cases, complexes of 1: 2 (L: M) with a much lower stability constant are also observed with potassium and sodium cations. Compounds with 15-membered crown-ether cycles form the most stable sandwich-type complexes with rubidium and potassium cations, and 18-membered ones with cesium cation. Substances that are promising as chemosensors for the determination of cesium and potassium cations in the presence of large excess sodium cation have been identified. By boiling for 2-3 weeks with a Dean-Stark nozzle to remove water of crown-containing benzyl with urea in benzene or toluene in the presence of trifluoroacetic acid as a catalyst with a yield ≥ 70%, bis (benzocrown ethers) with glycoluryl fragments were obtained. Methyl groups on the nitrogen atoms of the glycoluryl moiety

were introduced by methylation of the obtained compounds with methyl iodide in DMF in the presence of sodium hydride.

Індекс УДК: 547.8, 547.898

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.27.07

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Нові біс(бензокраун-етери) з хіноксаліновими та глікольурильними центральними фрагментами.

Назва продукції (англ): New bis(benzocrown ethers) with quinoxaline and glycoluril central fragments.

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Органічний синтез

Опис продукції (укр): Синтез біс(бензокраун-етерів) з центральним фрагментом хіноксаліну здійснено з високими виходами (63–89%) кип'ятінням краунвмістних бензилів з о-фенілендіамінами в етанолі в присутності ПТСК. Модіфіковано метод отримання похідних глікольурилу, що дозволило отримати біс(бензокраун-етери) з фрагментами глікольурилу з виходом ≥ 70%. Реакцію проводили протягом 2-3 тижнів кип'ятінням з насадкою Діна-Старка для видалення води краунвмістних бензилів з сечовиною в бензолі або толуолі в присутності трифлуорооцтової кислоти як каталізатора. Метилюванням отриманих сполук йодистим метилом в ДМФА в присутності гідриду натрію введені метильні групи по атомах Нітрогену глікольурильного фрагмента. Отримані біс(бензокраун-етери) є перспективними як хемосенсори для визначення катіонів цезію і калію у присутності великих надлишків катіонів натрію.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 01.199912.2020

Виробник продукції: Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України

Споживачі продукції: Учбові заклади

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Kikot L.S., Kulygina C.Yu., Lyapunov A.Yu., Shishkina S.V., Vaksler Y.A., Bogashchenko T.Yu., Kirichenko T.I. Synthesis and complexation of molecular clips based on diphenylglycoluril and halogenated dibenzocrown ethers with paraquat. Tetrahedron Letters. – 2020. Vol. 61, №18, Article 151839 – doi.org/10.1016/j.tetlet.2020.151839.

Кікоть Л.С., Ляпунов О.Ю., Басок С.С., Кулигіна К.Ю., Богащенко Т.Ю., Шишкіна С.В, Кириченко Т.І. Дослідження впливу жорсткого лінкеру на комплексоутворюючі властивості молекулярних рецепторів з краун-етерними фрагментами. XXV Українська конференція з органічної та біоорганічної хімії, Луцьк, 16-20 вересня 2019.

Кириченко Т.І., Кікоть Л.С., Ляпунов О.Ю., Басок С.С., Кулигіна К.Ю., Богащенко Т.Ю., Шишкіна С.В. Біс(бензокраун-етери), які відрізняються природою зв’язуючих цикли лінкерів. XXV Українська конференція з органічної та біоорганічної хімії, Луцьк, 16-20 вересня 2019.

Kikot L.S., Kulygina C.Yu., Lyapunov A.Yu., Basok S.S., Shishkina S.V., Bogaschenko T.Yu., Kirichenko T.I. The Influence of the Rigid Linker Nature on the Complexation Properties of Bis(Crown Ethers) with Various Hosts. 14th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry, м. Лечче (Італія), 2019, 2-6 June. – Abstracts. – P. 414.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 68

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Богащенко Тетяна Юріївна

Кикоть Леонід Станіславович (к. х. н.)

Кириченко Тетяна Іванівна (д. х. н., с.н.с.)

Кулигіна Катерина Юріївна (к. х. н., с.н.с.)

Ляпунов Олександр Юрійович (к. х. н., с.н.с.)

Яковенко Ірина Станіславівна

Керівник організації:

Андронаті Сергій Андрійович (д. х. н., професор, акад.)

Керівники роботи:

Кириченко Тетяна Іванівна (д. х. н., с.н.с.)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.