

# Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U033385

Державний реєстраційний номер: 0122U000344

Відкрита

Дата реєстрації: 26-12-2024



## 1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

**Назва етапу:** Синтез вихідних бензокраун-етерів та оксизаміщених бензокраун-етерів. Розробка ефективного методу отримання нових біс(бензокраун-етерів) з фрагментами конденсованих дифенілхромонів. Дослідження взаємодії синтезованих краун-сполук з органічними і неорганічними субстратами. Вивчення впливу розміру циклів краун-етерів на процес комплексоутворення. Оцінка перспективності використання синтезованих сполук в якості хемосенсорів.

**Початок етапу:** 01-2023

**Закінчення етапу:** 12-2024

**Вид звітнього документа:** Остаточний 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

**Напрямок фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

## Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 1963.080 тис. грн.

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Синтез і комплексоутворюючі властивості біс(бензокраун-етерів) з жорстким лінкером, що передорганізує краун-етерні цикли для взаємодії з субстратами

### Назва роботи (англ)

Synthesis and complexing properties of bis(benzocrown ethers) with a rigid linker that reorganizes crown ether cycles to interact with substrates

### Реферат (укр)

Об'єкт дослідження – Реакція гідроксибензокраун-етерів з бензилом, яка призводить до формування дифенілкумаранокумаронів. Комплексоутворюючі властивості біс(бензокраун-етерів), що містять фрагменти кумаранокумарону, які зв'язують краун-етерні цикли. Мета роботи – синтез нових біс(бензокраун-етерів) з жорстким лінкером на основі дифенілкумаранокумарона, який зв'язує краун-етерні цикли. Вивчення їх структури і властивостей. Дослідження процесів утворення комплексів гість-хазяїн синтезованих молекулярних пінцетів з молекулами-гістьми. Синтезовано молекулярні пінцети з фрагментами бензокраун-етерів і дифенілкумаранокумарона тривалим (96 год) нагріванням гідроксибензокраун-етерів і бензилу при 60 °C у суміші оцтової та соляної кислот з додаванням хлороформу. Очікувані сполуки були виділені у вигляді стійких клатратів з оцтовою кислотою. Виділити чисті продукти вдалося колонковою хроматографією на силікагелі, елюент хлороформ-метанол, 10:1. Спектрофотометричним титруванням вивчено комплексоутворення отриманих біс(краун-етерів) з катіонами лужних та лужноземельних металів і солями аліфатичних діамінів. З катіонами лужних металів утворюються комплекси лише складу 1:1. Отримані значення констант стійкості не дозволяють достовірно приписати комплексам структуру внутрішньомолекулярних сендвічів. З катіонами лужноземельних металів утворюються комплекси складу 1:1, константи стійкості яких вказують на участь у взаємодії лише одного краун-етерного циклу. Також утворюються дуже стійкі комплекси складу 2:1 (ліганд: метал). Усі вивчені діаміни утворюють комплекси складу 1:1 з біс(краун-етером) з 18-членними краун-етерними циклами. Значення констант стійкості комплексів свідчать, що во взаємодії приймає участь лише один краун-етерний цикл. Зафіксовано також поява комплексів складу 2:1 майже для всіх діамінів. Стійкість цих комплексів вища, ніж комплексів складу 1:1, особливо з діамінами з метиленовим ланцюжком (на 2-4 порядки логарифмічних одиниць).

### Реферат (англ)

The object of the research – The reaction of hydroxybenzocrown ethers with benzil, leading to the formation of diphenylcoumaranocoumarones. Complexing properties of bis(benzocrown ethers) containing coumarone moiety that links crown ether rings. The purpose of the work – synthesis of new bis(benzocrown ethers) with a rigid linker based on diphenylcoumaranocoumarone, which connects crown ether rings. Study of their structure and properties. Investigation of the processes of formation of guest-host complexes of synthesized molecular tweezers with guest molecules. Molecular tweezers with fragments of benzocrown ethers and diphenylcoumaranocoumarone were synthesized by prolonged (96 h) heating of hydroxybenzocrown ethers and benzil at 60 °C in a mixture of acetic and hydrochloric acids with the addition of chloroform. The expected compounds were obtained as stable clathrates with acetic acid. The pure products were isolated by column chromatography on silica gel, eluent chloroform-methanol, 10:1. The complexation of the obtained bis(crown ethers) with alkali and alkaline earth metal cations and salts of aliphatic diamines was studied by spectrophotometric titration. With alkali metal cations, complexes of only 1:1 composition are formed. The obtained stability constants values do not allow us to reliably attribute the structure of intramolecular sandwiches to the complexes. With alkaline earth metal cations, complexes of composition 1:1 are formed, the stability constants of which indicate the participation in the interaction of only one crown ether cycle. Very stable 2:1 ligand:metal complexes are also formed. All diamines studied form 1:1 complexes with bis(crown ether)s

with 18-membered crown ether rings. The stability constants values of the complexes indicate that only one crown-ether cycle participates in the interaction. The stability of 2:1 complexes is higher than that of 1:1 complexes by 2-4 orders of logarithmic units.

**Індекс УДК:** 547.7/.8 , 547.898

**Коди тематичних рубрик НТІ:** 31.21.27

## 6. Науково-технічна продукція (НТП)

### НТП 1

**Назва продукції (укр):** Метод синтезу і комплексоутворюючі властивості молекулярних пінцетів з фрагментами дифенілкумаранокумарону і бензокраун-етерів.

**Назва продукції (англ):** The method of synthesis and complexing properties of molecular tweezers with fragments of diphenylcoumaranocoumarone and benzocrown ethers.

**Очікувані результати:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** Органічний синтез

**Опис продукції (укр):** Вперше синтезовано молекулярні пінцети з фрагментами бензокраун-етерів і дифенілкумаранокумарона тривалим (96 год) нагріванням гідроксибензокраун-етерів і бензилу при 60 °C у суміші оцтової та соляної кислот з додаванням хлороформу. Очікувані сполуки були виділені у вигляді стійких клатратів з оцтовою кислотою. Виділити чисті продукти вдалося колонковою хроматографією на силікагелі, елюент хлороформ-метанол, 10:1. Спектрофотометричним титруванням вивчено комплексоутворення отриманих біс(краун-етерів) з катіонами лужних та лужноземельних металів і солями аліфатичних діамінів. На відміну від інших молекулярних пінцетів з фрагментами краун-етерів, отримані сполуки утворюють дуже стійкі комплекси складу 2:1 (ліганд: субстрат) з катіонами лужноземельних металів і солями аліфатичних діамінів.

**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:** 01.2023-12.2024

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

**Споживачі продукції:** Учні та наукові заклади

**Перспективні ринки:** Україна

**Права інтелектуальної власності:** За договорами

**Форми та умови передачі продукції:** Спільні НДДКР

## 7. Бібліографічний опис

Kulygina E., Kirichenko T. Synthesis and complexation of new molecular clips based on benzoaza-15-crown-5 and diphenylglycoluril with alkali and alkaline earth metal cations. Chemical Proceeding. – 2024. – Vol. 6, x. <https://doi.org/10.3390/ecsoc-28-20196>

Кириченко Т.І., Кулигіна К.Ю. Дослідження взаємодії бензилу з заміщеними фенолами, яке призводить до формування конденсованих хромонів. Вивчення впливу розчинників, кислотних добавок і температури на час і вихід продуктів реакції. В сб. «Найбільш вагомі фундаментальні та прикладні дослідження науковців регіону/ за заг. Ред. Буркінського Б.В.; НАН України, ДУ «Інститут ринку та економіко-екологічних досліджень НАН України» та іш. – Одеса ДУ «ІРЕЕД НАН України», 2023. – 400 с.

Богаченко Т.Ю., Кулигіна К.Ю., Мазепа О.В., Кириченко Т.І. Нові молекулярні пінцети з фрагментами бензокраун-етерів і дифенілкумаранокумарону: синтез і комплексоутворення. XXVI Українська конференція з органічної та біоорганічної хімії, Ужгород, 16–20 вересня 2024. – Тези доповідей. – С-14.

## 8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 50

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

## 9. Заключні відомості

### Перелік осіб-виконавців

Богащенко Тетяна Юріївна

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

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

Яковенко Ірина Станіславівна

### Керівник організації:

Кузьмін Віктор Євгенович (д. х. н., професор, академік)

### Керівники роботи:

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

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.