

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0223U000375

Державний реєстраційний номер: 0122U000344

Відкрита

Дата реєстрації: 06-01-2023



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: 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.

Початок етапу: 01-2022

Закінчення етапу: 12-2022

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

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 947.069 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 фенолів з бензилом, яка призводить до формування кумаранокумаронів. Мета роботи – розробка зручного метода синтезу нових біс(бензокраун-етерів) з жорстким лінкером на основі дифенілкумаранокумарона, який зв'язує краун-етерні цикли. Вивчено взаємодія оксибензокраун-етерів з бензилом в системі 66% CHCl_3 , 17% криж. CH_3COOH , 17% конц. HCl . Показано, що продукти реакції утворюють стійкі комплекси або клатрати з оцтовою кислотою. На модельній реакції бензилу з 3,4-диметоксифенолом досліджено вплив різних кислот, розчинників і температури на вихід та тривалість процесу формування жорсткого конденсованого фрагмента кумарону. Під час проведення реакції у поліфосфатній кислоті чи суміші сірчаної і фосфатної кислот отримати очікуваний продукт не вдається, реакція зупиняється на першій стадії. Нагрівання реагентів при 60 °C у суміші оцтової та соляної кислот з додаванням хлороформу, як описано раніше, дозволяє виділити продукт з виходом 53%, але потребує тривалого нагрівання – 96 год. При заміні оцтової кислоти на діоксан вдається досягти кращої гомогенності реакційної суміші. Однак вихід продукту при нагріванні при 60 °C протягом 96 і 60 годин становить 37–39%. Підняття температури до 70 °C дозволяє скоротити час нагрівання до 50 год і виділити продукт із виходом 49.57%.

Реферат (англ)

The object of research – the reaction of phenols with benzyl, which leads to the formation of coumaranocumarones. The aim of this work – development of a convenient method for the synthesis of new bis(benzocrown ethers) with a rigid linker based on diphenylcoumaranocoumarone, which binds crown ether rings. The interaction of oxybenzocrown ethers with benzyl in the system 66% CHCl_3 , 17% glacial CH_3COOH , 17% conc. HCl was studied. It is shown that the reaction products form stable complexes or clathrates with acetic acid. The influence of various acids, solvents, and temperature on the yield and duration of the process of formation of a rigid condensed fragment of coumarone was studied on the model reaction of benzyl with 3,4-dimethoxyphenol. During the reaction in polyphosphate acid or a mixture of sulfuric and phosphoric acids, it is not possible to obtain the expected product, the reaction stops at the first stage. Heating the reagents at 60 °C in a mixture of acetic and hydrochloric acids with the addition of chloroform, as described earlier, allows you to isolate the product with a yield of 53%, but requires prolonged heating – 96 hours. When replacing acetic acid with dioxane, it is possible to achieve better homogeneity of the reaction mixture. However, the yield of the product when heated at 60 °C for 96 and 60 hours is 37–39%. Raising the temperature to 70 °C allows to reduce the heating time to 50 hours and isolate the product with a yield of 49.57%.

Індекс УДК: 547.7/.8 , 547.898

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.27

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Оптимізація методу формування жорсткого конденсованого фрагмента дифенілкумаранокумарону.

Назва продукції (англ): Optimization of the method of forming a rigid condensed fragment of diphenylcoumaranocoumarone.

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Органічний синтез

Опис продукції (укр): Фрагмент дифенілкумаранокумарону має жорстку каркасну структуру і може використовуватися для синтезу молекулярних пінцетів з фрагментами бензокраун-етерів, які перспективні як сенсори для визначення іонів металів. Однак існуючі методи формування цього фрагменту потребують удосконалення. Як модельна реакція вивчено взаємодію бензилу з 3,4-диметоксифенолом і досліджено вплив різних чинників і добавок на хід реакції, її вихід та час. Заміна оцтової кислоти на діоксан і підняття температури реакції до 70 °С дозволяє скоротити час нагрівання з 96 до 50 год і виділити продукт із виходом 49.57%.

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: 01.2022-12.2022

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

Shishkina S.V., Dyakonenko V.V., Shishkin O.V., Semynozhenko V.P., Bogashchenko T.Yu., Lyapunov A.Yu., Kirichenko T.I. Halogen...л interactions in the complexes of fluorenonophane with haloforms. Structural Chemistry. – 2022. – Vol. 33, N 1. – P. 254–266.

О.В. Чепелев, К.Ю. Кулігіна Синтез ГАМК та глутамін-заміщених бензоаза-15-краун-5-етерів. Міжнародна научно-практична конференція «Актуальні питання науки, освіти і суспільства: теорія і практика», 2022, 28 жовтня, Умань, Україна. Збірник тез доповідей, С. 57.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 29

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Богаченко Тетяна Юріївна

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

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

Чепелев Олександр Володимирович

Яковенко Ірина Станіславівна

Керівник організації:

Кузьмін Віктор Євгенович (д. х. н., професор, член-кор.)

Керівники роботи:

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

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.