Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0215U006183

Державний реєстраційний номер: 0114U002762

Відкрита

Дата реєстрації: 10-03-2015

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Отримати низку нових функціоналізованих 2-алкіліденпіримідинів (2-АП). Виявити можливість використання спектрально-люмінесцентних особливостей отриманих сполук для оцінки фізико-хімічних властивостей мікросередовища та міжмолекулярних взаємодій.

Початок етапу: 04-2014

Закінчення етапу: 12-2014

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03534535

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

Телефон: 048 766-20-44: факс 048 765-96-02

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

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

Адреса: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442350981

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: http://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: 70 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Синтез нових похідних піримідинів та їх комплексів з d- та f-металами, як базових сполук для створення нових випромінювачів у широкому спектральному діапазоні та каталітичних систем перетворень гліцерину (відходу виробництва біодизелю) та його похідних в речовини і матеріали "малотоннажної хімії"

Назва роботи (англ)

Synthesis of new pyrimidines derivatives and their complexes with d- and f-metals as base compounds for formation of new emitters in a wide spectral range and catalytic systems of transformations of glycerol (biodiesel waste product) and its derivatives into substances and materials of "fine chemicals"

Реферат (укр)

Досліджено умови реакції 6-метил- та 6-феніл-2-тіоурацилу з рядом галогеноалканів, активованих нітрильними групами, в результаті чого розроблено однореакторний спосіб синтезу 2-алкіліден-1,3-дигідропіримідин-4-онів. Встановлено, що спектри поглинання розчинів досліджуваних похідних піримідину характеризуються широкими смугами в УФ-області, які відповідають ?-?*-переходам (?макс.=214-362 нм, lg?=4,0-4,7). При введенні ароматичних замісників спостерігається батохромний зсув смуг поглинання на 30-60 нм і підвищення інтенсивності поглинання у двічі. Сполуки також характеризуються широкими смугами флуоресценції в області 380-550 нм, а квантові виходи знаходяться у межах 0,0295-0,0862. Аналогічне також характерне для спектрів фосфоресценції, яка спостерігається в області 420-680 нм. В комплексах лантанідів з похідними піримідину інтенсивній люмінесцентний сигнал спостерігається в комплексах з 2-алкіліден-піримідинами, що містять у положенні "2" циклу ацетильні, етоксікарбонільні та нітрильні групи. Для таких комплексів люмінесценція фіксується у видимій (Eu(III) і Tb(III)) та ближній ІЧ (іони Yb (III)) областях.

Реферат (англ)

The reaction conditions of 6-methyl- and 6-phenyl-2-thiouracil with halogenoalkanes, activated by nitrile groups, are investigated; as result, preparation of 2-alkyliden-1,3-dihydropyrimidine-4-ones is worked out. It is set that the absorption spectrums of pyrimidines derivatives solutions are characterized by wide bands in UV, that correspond ?-?*- transition (?max=214-362 nm, lg?=4,0-4,7). There is bathochromic shift of absorption bands on 30-60 nm and increase of absorption intensity in two times at introduction of aromatic substituents. Compounds are also characterized by the wide fluorescence bands at 380-550 nm and quantum yields are 0,0295-0,0862. It is also characteristically for the phosphorescence that is observed in area of 420-680 nm. Intensive luminescent signal is observed in lanthanides complexes with 2-alkylidenepyrimidines containing in position "2" acetyl, ethoxycarbonyl, and nitrile groups. For such complexes luminescence is fixed in visible (Eu (III) and Tb (III)) and near IR (Yb (III)) areas

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.7/8; 547.426;547.426.2;535.37; 541,49; 542.61; 542.97;542.973 546.562

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.27

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Однореакторний спосіб синтезу 2-алкіліден-1,3-дигідропіримідин-4-онів взаємодією реагентів, що мають у екзоциклічній частині молекули карбонільні, дикарбонільні, нітрильні та ін. групи у спирті. Спектрально-люмінесцентні характеристики 2-алкіліденпіримідинів і їх лантанідвмісних (Eu(III), Tb(III), Yb (III)) комплексів.

Назва продукції (англ): Preparation of 2-alkyliden-1,3-dihydropyrimidine-4-ones by interaction of reagents, containing in exocyclic part carbonyl, dicarbonyl, nitrile etc groups, in an alcohol. Spectral-luminescent characteristic of 2-

alkylidenepyrimidines and them lanthanide-containing (Eu (III), Tb (III), Yb (III)) complexes.

Очікувані результати:

Галузь застосування: Хімічна промисловість

Опис продукції (укр): Досліджено умови реакції 6-метил- та 6-феніл-2-тіоурацилу з рядом галогеноалканів, активованих нітрильними групами, в результаті чого розроблено однореакторний спосіб синтезу 2-алкіліден-1,3-дигідропіримідин-4-онів, який полягає у взаємодії реагентів у спирті. У випадку нітрилів, в лужному середовищі, встановлена можливість зміни напряму реакції - в цих умовах переважно відбувається внутрішньомолекулярна циклізація з утворенням тіазоло[3,2-а]піримідин-5-ону. Інший варіант спостерігається при використанні нециклічних галоген -дикетонів. Взаємодія 6-метил-2-тіоурацилу з -хлороацетилацетоном або -бромодибензоїлметаном супроводжується кислотним розщепленням проміжних S-алкілпохідних до 2-оксопропілтіопіримідину та 2-оксо-2-фенілетилтіопіримідину, відповідно. Порівнюючи реакційну здатність 6-метил- та 6-феніл-2-тіоурацилів, можна констатувати, що в цілому останні значно менш схильні до екструзії сульфуру. Досліджувані сполуки характеризуються інтенсивним поглинанням в УФ-області та широкими смугами флуоресц

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 2016

Виробник продукції: ФХІ ім. О.В.Богатського НАН України

Споживачі продукції: Хімічна галузь

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Яволовский А.А., Ганин Э.В., Фонарь М.С. Пиримидины с функциональными группами со связями азот-кислород и азот-сера, N-оксиды 1,2,5-окса-, тиа- и селендиазоло[3,4-d]пиримидинов. В кн. "Химия гетероциклических соединений. Современные аспекты. М.:МБФНП. - 2014. - Т. 1. - С. 582-587.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 30

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Іванов Ю.Е.

Камалов Г.Л.

Коровін О.Ю.

Русакова Наталя Володимирівна (д. х. н., с.н.с.)

Снурнікова Н.В.

Фадєєв Є.М.

Яволовський А.О.

Керівник організації:

Андронаті Сергій Андрійович

Керівники роботи:

Камалов Герберт Леонович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.