Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0223U001268

Державний реєстраційний номер: 0122U001817

Відкрита

Дата реєстрації: 26-01-2023

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка препаративних методів, проведення синтезів органічних, координаційних та металоорганічних сполук.

Початок етапу: 02-2022

Закінчення етапу: 12-2022

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070944

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Телефон: 380442393333

E-mail: office.chief@univ.net.ua

WWW: http://www.univ.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

Телефон: +380444813221

Телефон: mon@mon.gov.ua

E-mail: mon@mon.gov.ua

WWW: https://mon.gov.ua/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: 2201040

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 1007.298 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Розробка нових сполук для діагностичного та терапевтичного застосування в ядерній медицині та терапії злоякісних пухлин

Назва роботи (англ)

Development of new compounds for diagnostic and therapeutic applications in nuclear medicine and treatment of malignant tumors

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження: процеси одержання нових хелатних і полінуклеативних лігандів та координаційних сполук платинової групи металів і перехідних металів на їх основі. Мета роботи: розробка препаративних методів синтезу нових хелатних агентів та координаційних сполук металів платинової групи та 3d-металів на основі полідентатних органічних лігандів. Методи дослідження: ЯМР-, електронна та ІЧ-спектроскопія, ESI масспектрометрія. Комплексні сполуки купруму(II), паладію(II), платини та рутенію було отримано шляхом реакції хелатуючих лігандів та відповідних солей металів з їх подальшою кристалізацією з реакційної суміші. Синтезовані сполуки були ідентифіковані та охарактеризовані методами спектрального аналізу (ІЧ, УФ, ЯМР, мас-спектрометрія). На прикладі найпростішої системи 3,5-заміщеного триазольного ліганду, зафіксовано утворення поліядерних лінійних ансамблів CuII та [Cu4(триазол)6], котрі формуються за допомогою багатоцентрових взаємодій органічних лігандів з металічними центрами у координаційні каркаси (CuII-[N-N]-CuII) та підтримуються містковими неорганічними аніонами. Виявлено основні закономірності координації 3-піридин-1,2,4-триазолів з купрум(II) іоном: ліганди утворюють моноядерні комплекси, при реакції з металом у співвідношенні 2:1, та біядерні комплекси при реакції з металом у співвідношенні 1:1. Також було встановлено, що аніон солей купруму(II) не впливає на ядерність структур. Більш значущим для комплексоутворення є замісник у 5 положенні триазольного кільця, що впливає на кислотність триазольного протону. Так, наприклад, електронодонорна група -CH3 (метил) зумовлює збільшення основних властивостей ліганду, що призводить до збільшення значення pKa1 та pKa2. Тоді як електроноакцепторна група, наприклад, замісник фенільна група (-Ph), знижує значення негативних логарифмів констант кислотної дисоціації, у порівнянні до незаміщенного 3-(2-піридил)-1,2,4-триазолу, що пришвидшує депротонування відповідного ліганду.

Реферат (англ)

Object of research: processes of obtaining new chelating and polynucleating ligands and coordination compounds of platinum group metals and transition metals based on them. The purpose of the work: development of preparative methods for the synthesis of new chelating agents and coordination compounds of platinum group metals and 3d metals based on polydentate organic ligands. Research methods: NMR, electron and IR spectroscopy, ESI mass spectrometry. Complex compounds of copper(II), palladium(II), platinum, and ruthenium were obtained by the reaction of chelating ligands and corresponding metal salts with their subsequent crystallization from the reaction mixture. The synthesized compounds were identified and characterized by spectral analysis methods (IR, UV, NMR, mass spectrometry). On the example of the simplest system of a 3,5-substituted triazole ligand, the formation of polynuclear linear ensembles of CuII and [Cu4(triazole)6], which are formed with the help of multicenter interactions, was recorded of organic ligands with metal centers into coordination frameworks (CuII-[N-N]-CuII) and supported by bridging inorganic anions. The main patterns of coordination of 3-pyridine-1,2,4-triazoles with cuprum(II) ion were revealed: ligands form mononuclear complexes when reacted with a metal in a ratio of 2:1, and binuclear complexes when reacted with a metal in a ratio of 1:1. It was also established that the anion of copper(II) salts does not affect the nuclearity of the structures. More significant for complexation is the substituent in the 5-position of the triazole ring, which

affects the acidity of the triazole proton. So, for example, the electron-donating group -CH3 (methyl) leads to an increase in the basic properties of the ligand, which leads to an increase in the values of pKa1 and pKa2.

Індекс УДК: 546, 577.1:616-006

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.17.15, 31.27.31

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Комплексні сполуки

Назва продукції (англ): Complex compounds

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Опис продукції (укр): Комплексні сполуки купруму(II), паладію(II), платини та рутенію було отримано шляхом реакції хелатуючих лігандів та відповідних солей металів з їх подальшою кристалізацією з реакційної суміші. Синтезовані сполуки були ідентифіковані та охарактеризовані методами спектрального аналізу (ІЧ, УФ, ЯМР, мас-спектрометрія). На прикладі найпростішої системи 3,5-заміщеного триазольного ліганду, зафіксовано утворення поліядерних лінійних ансамблів CuII та [Cu4(триазол)6], котрі формуються за допомогою багатоцентрових взаємодій органічних лігандів з металічними центрами у координаційні каркаси (CuII-[N-N]-CuII) та підтримуються містковими неорганічними аніонами. Виявлено основні закономірності координації 3-піридин-1,2,4-триазолів з купрум(II) іоном: ліганди утворюють моноядерні комплекси, при реакції з металом у співвідношенні 2:1, та біядерні комплекси при реакції з металом у співвідношенні 1:1. Також було встановлено, що аніон солей купруму(II) не впливає на ядерність структур. Більш значущим для комплексоутворення є замісник у 5 положенні триазольного кільця, що впливає на кислотність триазольного протону. Так, наприклад, електронодонорна група -CH3 (метил) зумовлює збільшення основних властивостей ліганду, що призводить до збільшення значення pKa1 та pKa2. Тоді як електроноакцепторна група, наприклад, замісник фенільна група (-Ph), знижує значення негативних логарифмів констант кислотної дисоціації, у порівнянні до незаміщенного 3-(2-піридил)-1,2,4-триазолу, що пришвидшує депротонування відповідного ліганду. Комплексоутворення із серією заміщених лігандів 1-(5R1,2,4-триазол-3-іл)амінометилу було досліджено із різними солями міді(II) в аналогічних умовах до вищенаведених. Експериментальним чином було встановлено, що заміщений амінометил-триазол найкраще реагує із солями міді у вільному стані групи -NH2. Тенденція до утворення поліядерних комплексів із цією серією лігандів зумовлена невеликим розміром лігандів та мінімальною стеричністюамінометильного замісника.

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: Впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: Київський національний університете імені Тараса Шевченка

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 6; монографій, підручників, посібників, словників, довідників, наукових статей, інших публікацій; подані заявки та отримані патенти; теми захищених дисертацій - 6.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 59

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Ващенко Олександр Віталійович (к. х. н.)

Дорощук Роман Олександрович (к. х. н., с.н.с.)

Захарченко Борис Володимирович (к. х. н.)

Казіміров Володимир Петрович (д. х. н., професор)

Плутенко Максим Олександрович (к. х. н., н.с)

Распертова Ілона Володимирівна (к. х. н., с.н.с.)

Хоменко Дмитро Миколайович (к. х. н., старший науковий співробітник)

Керівник організації:

Толстанова Ганна Миколаївна (д. б. н., професор)

Керівники роботи:

Лампека Ростислав Дмитрович (д. х. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.