Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0211U009524

Державний реєстраційний номер: 0111U004814

Відкрита

Дата реєстрації: 26-12-2011

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Створення наноструктурних каліксаренових рецепторів для високоселективного розпізнавання і зв'язування органічних молекул в газовій фазі і розчинах.

Початок етапу: 07-2011

Закінчення етапу: 12-2011

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут органічної хімії НАН України.

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Підпорядкованість: Президія Національної академії наук України

Адреса: 02660, Київ-94,вул.Мурманська,5

Телефон: 292-71-50

Телефон: 573-26-43

E-mail: ioch@ioch.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут органічної хімії НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Адреса: вул.Мурманська,5, м. Київ, Київська обл., 02660, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380444994613

E-mail: ioch@ioch.kiev.ua

WWW: http://ioch.kiev.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)

Створення наноструктурних каліксаренових рецепторів для високоселективного розпізнавання і зв'язування органічних молекул в газовій фазі і розчинах.

Назва роботи (англ)

Creation of nanostructural calixarene receptors for high selective recognition and binding organic molecules in gas phase and solutions

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження - калікс[n]арени та тіакалікс[n]арени. Мета дослідження - теоретичне прогнозування стабільності адуктів аніон-каліксарен, дослідження їх структури, енергії та механізмів стабілізації, розробка високочутливих та високоселективних рецепторів молекул та іонів, розробка методів синтезу моно- та діалкільованих похідних тіакалікс[4]арену. Методи дослідження - органічний синтез, високоефективна рідинна хроматографія, рентгеноструктурний аналіз, ядерний магнітний резонанс, молекулярне моделювання. Розроблені методи синтезу нових типів каліксаренів з електронодефіцитними поліфторфенільними замісниками на верхньому вінці макроциклу, а також моно- та діалкільованих похідних тіакалікс[4]арену. Досліджено вплив природи алкілуючих агентів, розчинників та основ на реакцію алкілування. Виявлено аналітичні ознаки конформацій алкоксипохідних тіакалікс[4]арену. Синтезовано ряд високоефективних синтонів на основі тіакалікс[4]арену - три- та тетрахлорметилтіакалікс[4]арени, трибромтіакалікс[4]арени, триазотіакалікс[4]арени. Синтезовано похідні тіакалікс 4 арену, що містять диалкоксифосфонільні, диалкіл(дифеніл)фосфіноксидні та дигідрокси-фосфонільні групи. Методами рідинної хроматографії, молекулярного моделювання, ядерного магнітного резонансу та рентгеноструктурного аналізу досліджено фізико-хімічні властивості, молекулярна та кристалічна структура, а також конфігурація синтезованих сполук.

Реферат (англ)

The object of the investigation - calix[n]arenes and thiacalix[n]arenes. The aim of the investigation - theoretical prognosis of the stability of anion-adducts anion- calixarene, the study of their structure, the energy and the mechanisms of stabilization, the elaboration of high sensitive and high selective receptors of the molecules and ions, the elaboration of the synthesis method mono- and dialkyl derivatives of thiacalix[4]arene. The methods of the investigation - organic synthesis, high-performance liquid chromatography, roentgen structurel analysis, nuclear magnetic resonance, molecular modeling. The new types of calix[n]arenes with electonoscarce polyfluorophenyl substituents at the upper rim of the macrocycle have been synthesized. The influence of the nature of alkyl reagents, solvents and bases on the reaction of alkylation have been investigated. The analytical characteristics of the conformations of alkoksy derivatives of thiacalix[4]arene have been established. The number of high effective syntones at the base of thiacalix[4]arene, three- and tetrachloromethyl- thiacalix[4]arene, threebromothiacalix[4]arene, threeazothiacalix[4]arene have been synthesized. The number of derivatives of thiacalix[4]arene contained at the upper rim dialkoksyphosphonyl, dialkil(diphenyl)phosphinoxy and dihydroxyphosphonyl groups have been synthesized. The nature of fluorophenyl derivatives of calixarenes have been investigated by the nuclear magnetic resonance method and roentgen structurel analysis. The conformations of fluorophenyl derivatives of calixarenes in gas phase, as well as the energies of their interactions "Host-Guest" with nucleophilic molecules and the mechanisms of the stabilization of the adducts formed have been calculated. The synthesis methods of mono-and dialkyl derivatives of thiacalix[4]arene have been elaborated. Physical-chemical properties, molecular and crystal structure of the substances synthesized have been studied by high-performance liquid chromatography, molecular modeling, nuclear magnetic resonance and roentgen structural method.

Індекс УДК: 547, 547.541 + 547.898

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Нові типи поліфторзаміщених каліксаренів, синтони на основі тіакалікс-[4]арену (хлорметилтіакалікс[4]арени, трибромтіакалікс[4]арени, триазотіакалікс[4]арени) та його галоген-, азот- та фосфоровмісних похідних.

Назва продукції (англ): The new types of polyfluorosubstituted calixarenes, synthons based on the thiacalix[4]arene (chloromethylthiacalix[4]arenes, tribromthiacalix[4]arenes, tria-zothiacalix[4]arenes) and its halogen-, nitrogen- and phosphorus containing derivatives.

Очікувані результати:

Галузь застосування: 73.10.1

Опис продукції (укр): Розроблено методи синтезу нових типів каліксаренів з електронодефіцитними поліфторфенільними замісниками на верхньому вінці макроциклу. Отримано високоефективні синтони на основі тіакалікс[4]арену - три- та тетрахлорметилтіакалікс[4]арени, трибромтіакалікс[4]арени, триазо-тіакалікс[4]арени, а також похідні тіакалікс 4 арену, що містять диалкокси-фосфонільні, диалкіл(дифеніл)фосфіноксидні та дигідроксифосфонільні групи. Методами рідинної хроматографії, молекулярного моделювання, ядерного магнітного резонансу та рентгеноструктурного аналізу досліджено фізико-хімічні властивості, просторова структура та конфігурація синтезованих сполук.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: -

Виробник продукції: ІОХ НАНУ

Споживачі продукції: Синтетична хімія, медицина, біохімія, сенсорна техніка

Перспективні ринки: Медичні та біологічні лабораторії та науково-дослідні установи України та розвинутих країн світу

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Продаж продукції

7. Бібліографічний опис

Kalchenko O.I., Cherenok S.O., Yushchenko O.A., Kalchenko V.I. HPLC study of the complexation of calix[4]arene phosphonic acids with amino acids. 4th International Summer School "Supramolecular Systems in Chemistry and Biology". September, 12-15, 2011, Regensburg (Germany). Book of abstracts, P.15.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 92

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Єсипенко Олександр Адольфович

Довгоп'ята Лідія Соловеївна

Драпайло Андрій Богданович

Мірошниченко Станіслав Іванович

Пироженко Володимир Валентинович

Поволоцький Марко Йосипович

Родік Роман Васильович

Роженко Олександр Борисович

Рубан Олександр Володимирович

Черенок Сергій Олексійович

Чернега Олександр Миколайович

Ющенко Олександр Анатолійович

Керівник організації:

Кальченко Віталій Іванович

Керівники роботи:

Кальченко Ольга Іванівна

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.