

ЗАТВЕРДЖУЮ
Керівник підприємства/установи/організації
(Грантоотримувача)
(посада)
— директор Інституту —



АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту
із виконання наукових досліджень і розробок

Латентні карбени для органічного синтезу

_____ (назва Проєкту)

Назва конкурсу: «ПІДТРИМКА ДОСЛІДЖЕНЬ ПРОВІДНИХ ТА МОЛОДИХ УЧЕНИХ»

Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0105 _____

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок
(реєстраційний номер та назва Проєкту) реєстраційний номер 2020.02/0105 «Латентні карбени для органічного синтезу»

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «ПІДТРИМКА ДОСЛІДЖЕНЬ ПРОВІДНИХ ТА МОЛОДИХ УЧЕНИХ» (назва конкурсу) протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21.

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту

Початок – дата укладання Договору про виконання наукових досліджень і розробок;

3 листопада 2020 р.

Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проєкту, грн. 5 178 526

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік _____ 628 526 грн _____

2-й рік _____ 1 820 000 грн _____

3-й рік _____ 2 730 000 грн _____

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту буде залучено 6 виконавців, з них:

доктори наук 1;

кандидати наук 3;

інші працівники _____ 2 _____.

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Немає

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків) Розробка нового типу нуклеофільних карбенів - латентних карбенів, які є нейтральними, координаційно насиченими сполуками, що існують у рівновазі з високореакційними карбеновими формами.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків) Дизайн, розробка та синтез елементоорганічних сполук, які існують у рівновазі між карбеновою та нейтральною формами. Розробка методу синтезу відібраних сполук. Експериментальна перевірка наявності рівноваги в цих сполуках за допомогою типових для карбенів реакцій - взаємодії сполук із сіркою або селеном. Подальше дослідження взаємодії сполук з органічними та неорганічними субстратами.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків). Нуклеофільні карбени, які проявляють свою активність за рахунок 1,2-зсуву функціональної групи, майже не вивчені. До таких карбенів належать силільовані диметилформаміди, які існують у рівновазі з карбеновою формою, що підтверджується взаємодією з похідними піридинів та заміщених бензолів за механізмом вклинення в С-Н зв'язки.

- Новизна Проєкту (до 400 знаків). Розробка та дослідження органічних сполук, які знаходяться в рівновазі з карбеновою формою. Вивчення факторів, що дадуть змогу впливати на рівновагу і прискорювати реакцію. Такими факторами є мікрохвильове випромінювання, температура, каталізатори – кислоти та основи Льюїса. Дослідження нуклеофільних карбенів у реакціях вклинення в СН зв'язок різної гібридизації: sp , sp^2 та sp^3 .

- Методологія дослідження (до 400 знаків). Методологія дослідження базується на перевірці гіпотези стосовно можливої міграції функціональних груп у діамінокарбенах, аміно(окси)-карбенах та ряду інших споріднених сполук. Спочатку за допомогою DFT розрахунків окреслюється коло можливих кандидатів, а далі вони тестуються в декількох типових для карбенів реакціях.

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

Отримані унікальні, високореакційноздатні елементоорганічні сполуки, які є стабільними сполуками. Для них можливе масштабування, зберігання та транспортування; й у той же час вони проявляють високу реакційну здатність, властиву нуклеофільним карбенам.

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

Були отримані стабільні, високореакційноздатні елементоорганічні сполуки, які знаходяться в рівновазі з карбеновою формою, яка в багатьох випадках визначає їх реакційну здатність. Сполуки такого типу є унікальними. Їх досить легко отримувати, зберігати та застосовувати в хімічній практиці.

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

Не передбачається

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

Сполуки, які були розраховані, а згодом синтезовані, виявили властивості карбенів. Слід зазначити, що за останні три десятиліття хімія карбенів добре вивчена. Однак, перевага надавалася їх застосуванню як лігандів в металокомплексному каталізі. Ми пропонуємо застосувати їх в органічній, елементоорганічній хімії та хімії матеріалів. Можливість отримати такі сполуки в грамових кількостях, зберігати їх та застосовувати як звичайні реагенти відкриває необмежені можливості, які на подальших етапах цього проєкту ми збираємося продемонструвати.

Примітка: Анотований звіт не повинен містити відомостей, заборонених до відкритого опублікування

Науковий керівник Проєкту

Завідувач відділом

(посада)

Костюк О.М.

ПІБ

(підпис)

