

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Керівник підприємства/установи/організації  
(Грантоотримувача)  
(директор Інституту)  
Михайло ВОВК



**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**  
**про виконану роботу у 2021 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 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» протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21

**1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ**

Загальна тривалість виконання проєкту 2020 рік – 2022 рік

Тривалість виконання Проєкту у 2021 році

Початок – 07 травня 2021 року

\_\_\_\_\_ (дата укладання Договору про виконання наукового дослідження і розробки)

Закінчення – 15 грудня 2021 року \_\_\_\_\_

Загальна вартість Проєкту, грн. 5 085 856

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 628 256 \_\_\_\_\_

2-й рік 1 727 600 \_\_\_\_\_

3-й рік 2 730 000 \_\_\_\_\_

**2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ**

до виконання Проєкту залучено 6 виконавців, з них:

доктори наук 1 \_\_\_\_\_;

кандидати наук          3   ;  
інші працівники        2   .

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

Інститут органічної хімії НАН України, 02660 м. Київ, вул. Мурманська, 5

### **4. ОПИС ПРОЄКТУ**

**4.1. Мета Проєкту** 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** 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. 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 C-N зв'язки.

- Новизна Проєкту. 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, каталізatori – кислоти та основи Льюїса. Дослідження нуклеофільних карбенів у реакціях вклинення в СН зв'язок різної гібридизації:  $sp$ ,  $sp^2$  та  $sp^3$ .

- Методологія дослідження. 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)**

На даному етапі були досліджені реакції силілформамідину з піридиновими та піримідиновими похідними, які є представниками електронозбіднених гетероциклічних систем, а також з похідними тіофену та піразолу та їх бензоанельованими похідними. Було показано, що введення двох електроноакцепторних замісників достатньо для активації цих гетероциклів. Отримані похідні цих гетероциклів за рахунок вклинення в C-N зв'язки. Ці похідні були перетворені в відповідні альдегіди.

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

Запропонований метод є зручним, ефективним синтетичним підходом до піридин альдегідів та має очевидні препаративні переваги перед існуючими методами синтезу. Розроблений нами метод дає можливість отримувати важкодоступні похідні тіофенів, є зручним методом для синтезу диальдегідів, та метилімінів альдегідів. Експериментальні умови проведення реакції є надзвичайно простими, в багатьох випадках реакцію можливо проводити без розчинника.

**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.**

Реакції нуклеофільного вклинення триметилсиліл-N,N,N'-триалкіл-формамідину з похідними бензолу, піридину, піразолу, тіофену підтвердили наявність карбенової форми та показали її високу активність. Таким чином, ми продемонстрували можливість його застосування для функціоналізації електронозбіднених гетероциклічних та ароматичних систем. Запропонований нами метод, в багатьох випадках, унікальним методом функціоналізації цих систем і без всяких сумнівів знайде практичне застосування.

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

**Науковий керівник Проєкту**

Завідувач відділу \_\_\_\_\_  
(посада)

Олександр КОСТЮК

\_\_\_\_\_  
(Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

\_\_\_\_\_  
(підпис)

