

Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0120U104905

Відкрита

Дата реєстрації: 17-11-2020

Статус виконавця: 17 - головний виконавець



1. Загальні відомості

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 6541030

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 8650

У тому числі по роках (тис. грн.):

| Рік | Фінансування |
|------|--------------|
| 2021 | 1630 |
| 2022 | 1760 |
| 2023 | 1900 |
| 2024 | 1680 |
| 2025 | 1680 |

2. Замовник

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

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

Підпорядкованість:

Телефон: 380442350981

Телефон: 380442262341

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: <http://nas.gov.ua>

3. Виконавець

Назва організації: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Мурманська, буд. 5, м. Київ, Київська обл., 02094, Україна

Телефон: 380445527150

Телефон: 380445510613

Телефон: 380445732643

E-mail: ioch@ioch.kiev.ua

WWW: <http://ioch.kiev.ua>

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Структура, властивості та реакційна здатність нових напівпродуктів тонкого органічного синтезу - перспективних будівельних блоків для медичної хімії та агрохімії

Назва роботи (англ)

Structure, properties and reactivity of the new intermediates of fine organic synthesis-promising building blocks for medical chemistry and agrochemistry

Мета роботи (укр)

Метою роботи є дослідження структури нових малих молекул – потенційних будівельних блоків, механізму реакцій їх синтезу, їх фізичних, (фізико-)хімічних властивостей та реакційної здатності. Мета досягається шляхом вивчення кінетики та термодинаміки реакцій за допомогою структурних, спектральних та теоретичних методів; вивченням особливостей структури відомих та нових будівельних блоків спектральними, теоретичними методами та методом рентгеноструктурного дослідження монокристалів; вивчення стійкості та реакційної здатності хімічних сполук; дослідження взаємодії субстрат-мішень за допомогою методів ЯМР, комп'ютерної хімії та молекулярного докінгу.

Мета роботи (англ)

The aim of the work is to study the structure of new small molecules-potential building blocks, the mechanism of their synthesis reactions, their physical, (physico-) chemical properties and reactivity. The goal is achieved by the investigation of the kinetics and thermodynamics of the reactions using structural, spectral and theoretical methods, studying of the structural features of the known and new building blocks by spectral and theoretical methods and by single crystal X-ray diffraction, research of stability and reactivity of chemical compounds; study of the target-substrate interactions using NMR, computational chemistry and molecular docking.

Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності: Фундаментальні наукові дослідження з найважливіших проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 - фундаментальна

Очікувані результати: Матеріали, Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 - Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природних і технічних наук

Експерти

Картель Микола Тимофійович (д. х. н., акад.)

6. Етапи виконання

| Номер | Початок | Закінчення | Звітний документ | Назва етапу |
|-------|---------|------------|------------------|---|
| 1 | 01.2021 | 12.2021 | Проміжний звіт | Дослідження структури, стабільності та реакційної здатності будівельних блоків на основі каркасних сполук, сполучених з малими (тричленими та чотиричленими) циклами. Вивчення комплексоутворення внутрішньохіральных каліксаренів з малими органічними молекулами методом ЯМР. |
| 2 | 01.2022 | 12.2022 | Проміжний звіт | Дослідження конформаційних перетворень та прогнозування біологічної активності будівельних блоків модифікованих фторозаміщеними циклоалкілними замісниками. |
| 3 | 01.2023 | 12.2023 | Проміжний звіт | Молекулярний дизайн та кристалічна інженерія нових перспективних будівельних блоків для медичної хімії та агрохімії. Квантово-хімічні розрахунки похідних дифтороциклорпропанів та вивчення механізму реакції їх утворення. |
| 4 | 01.2024 | 12.2024 | Проміжний звіт | Кінетичні дослідження реакцій синтезу будівельних блоків. |
| 5 | 01.2025 | 12.2025 | Остаточний звіт | Структурні та спектральні дослідження нових каталізаторів. Вивчення механізму каталітичного синтезу нових будівельних блоків. |

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.27, 31.21.29, 31.21.25

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.1'1, 547.52/.68, 547.7/.8 547.1'1 547

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Кальченко Віталій Іванович (д. х. н., акад.)

Керівники роботи:

Роженко Олександр Борисович (д.х.н., с.н.с.)

Відповідальний за подання документів: Кирильчук Андрій Анатолійович (Тел.: +38 (098) 059-11-69)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.