

# Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0120U104977

Відкрита

Дата реєстрації: 19-11-2020

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.):** 13600

**У тому числі по роках (тис. грн.):**

Рік	Фінансування
2021	2400
2022	2600
2023	2800
2024	2900
2025	2900

## 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)

Функціональний дизайн, синтез та спрямована модифікація біопривабливих конденсованих азольних, азинових та азепінових сполук

#### Назва роботи (англ)

Functional design, synthesis and directed modification of bioattractive condensed azole, azine and azepine compounds

#### Мета роботи (укр)

Метою роботи є створення методологічних засад конструювання нових, перспективних для органічного синтезу та медико-біологічних досліджень, типів азоло-азольних (піролотіазоли, імідазотіазоли), азоло-азинових (піразолопіридини, піразолопіримідини, піразолопіразини, 1,2,3-триазолопіридини, 1,2,3-триазолопіримідини, піролохіназоліни) та азоло-азепінових (піразолоазепіни, 1,2,3-триазолоазепіни) сполук, структурно модифікованих лінійно-функціональними та гетероанельованими фрагментами. При цьому значна увага буде зосереджена на дизайні тих конденсованих похідних, які містять ключові для подальших синтетичних трансформацій галогеноалкільні, формільні, карбоксильні, алкенільні, алкінільні, аміно- та гідразиногрупи. Для досягнення поставленої мети будуть суттєво вдосконалені відомі та розроблені нові, в першу чергу каталітичні, методи функціоналізації та анелювання малих та середніх гетероциклічних ядер до базових азольних та азинових темплатів. Важлива роль в процесі дослідження буде відведена встановленню закономірностей регіо- та стереоконтролю в процесі реалізації високоселективних методів циклізації для спрямованого синтезу конденсованих гетероциклічних, сполук як молекулярних платформ для дизайну біоактивних речовин. Виражені фармакологічні властивості функціональних похідних гетероанельованих азолів, азинів та азепінів видаються вагомою підставою як для розроблення ефективних синтетичних підходів до їх нових представників, так і для селективної модифікації з метою отримання сполук із широким сегментом біологічної дії.

#### Мета роботи (англ)

The purpose of the work is to create methodological bases for designing new promising for organic synthesis and biomedical research types of azole-azole (pyrrolothiazoles, imidazothiazoles), azole-azine (pyrazolopyridines, pyrazolopyrimidines, pyrazolopyrazines, 1,2,3-triazolopyridines, 1,2,3-triazolopyrimidines, pyrroloquinazolines) and azolo-azepine (pyrazoloazepines, 1,2,3-triazoloazepines) compounds, structurally modified by linear-functional and heteroanelated fragments. In this case, considerable attention will be focused on the design of those condensed derivatives that contain key for further synthetic transformations haloalkyl, formyl, carboxyl, alkenyl, alkynyl, amino and hydrazino groups. To achieve this goal, the known and new, especially catalytic, methods of functionalization and annelation of small and medium heterocyclic nuclei to basic azole and azine templates will be significantly improved and developed. An important role in the research process will be assigned to

the establishment of patterns of regio- and stereocontrol in the implementation of highly selective cyclization methods for the directed synthesis of condensed heterocyclic compounds as molecular platforms for the design of bioactive substances. The pronounced pharmacological properties of functional derivatives of heteroanylelated azoles, azines and azepines seem to be an important basis both for the development of effective synthetic approaches to their new representatives and for selective modification to obtain compounds with a wide segment of biological action.

**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:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** Фармацевтика, агрохімія

## 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	Розроблення методології синтезу, селективного гетероанелювання та функціоналізації нових похідних піразоло(триазоло)азинів.
2	01.2022	12.2022	Проміжний звіт	Синтез анелюваних та функціонально модифікованих піразоло[1,5-а]піразинових структур та їх гідрованих аналогів
3	01.2023	12.2023	Проміжний звіт	Застосування стратегії електрофільної внутрішньомолекулярної циклізації для конструювання аналогів піроло(піридо)-[1,2-а]хіназолінових алкалоїдів та функціонально заміщених конденсованих азепінів
4	01.2024	12.2024	Проміжний звіт	Створення підходів до селективної функціоналізації фтороалкільмісних піримідинових сполук - перспективних молекулярних платформ для одержання конденсованих та лінійно-модифіко-ваних біоперспективних похідних
5	01.2025	12.2025	Остаточний звіт	Дизайн, синтез та медико-біологічне дослідження нових металохелаторів на основі азоло(азино)функціоналізованих алкенів та гідроксамових кислот

## 7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

**Коди тематичних рубрик НТІ:** 31.21.25.09, 31.21.27, 31.21

**Індекс УДК:** 547.64, 547.7/.8, 547, 547.8 547.85 547.89

## 8. Заключні відомості

### Керівник організації:

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

### Керівники роботи:

Вовк Михайло Володимирович (д. х. н., професор)

**Відповідальний за подання документів:** Васькевич Алла Іржіївна (Тел.: +38 (095) 494-71-65)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.