

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0225U002059

Державний реєстраційний номер: 0123U101168

Відкрита

Дата реєстрації: 17-02-2025



1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Теоретичне обґрунтування та синтетичне доведення можливостей нових доміно-реакцій.

Початок етапу: 01-2024

Закінчення етапу: 12-2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Український державний університет науки і технологій

Код ЄДРПОУ/ІПН: 44165850

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: вул. Лазаряна, буд. 2, м. Дніпро, Дніпровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Телефон: 380567765947

E-mail: udunt@diit.edu.ua

WWW: <http://diit.edu.ua/>

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: проспект Берестейський, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.gov.ua

WWW: <https://mon.gov.ua/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: 2201020

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 – кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 1000.000 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Нові принципи синтезу флуоресцентних матеріалів та біологічно-активних N-, S-вмісних гетероциклів.

Назва роботи (англ)

New principles of synthesis of fluorescent materials and biologically active N,S-containing heterocycles.

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження – NIR (Near InfraRed)-флуоресцентні барвники, фотоелементи для сонячних батарей та оптичні фільтри, а також N,S-альфа-амідоалкілювання та споріднені процеси для створення функціоналізованих гетероциклічних систем – потенційних фармсустанцій. Мета роботи – визначення оптимальних умов синтезу низки ксантенових барвників та дослідження їх спектральних властивостей; розробка зручних методів одержання нових типів N,S-амідоалкілюючих та споріднених реагентів з гетерокумуленовими угрупованнями. Методи дослідження – хімічний синтез, тонкошарова хроматографія (ТШХ), рентгеноструктурний аналіз (РСА), інфрачервона спектроскопія (ІЧ-) та ядерний магнітний резонанс (ЯМР)-спектроскопія, ультрафіолетова спектроскопія (УФ), мас-спектрометрія та квантово-хімічні розрахунки. Розроблено: Метод синтезу ксантенового рН-індикатору, метод синтезу N-амідоалкілованих похідних 2,5-діаміно-1,3,4-тіадіазолу, спосіб отримання ксантеноподібного рН-індикатору та метод синтезу похідних 4,5,6,7-тетрагідробензофуранів. Галузь використання результатів роботи – С 21.10 виробництво основних фармацевтичних продуктів, С 20.12 Виробництво барвників.

Реферат (англ)

The object of research is NIR (Near InfraRed)-fluorescent dyes, photocells for solar cells and optical filters, as well as N,S-alpha-amidoalkylation and related processes for the creation of functionalized heterocyclic systems - potential pharmaceutical substances. The purpose of the work is to determine the optimal conditions for the synthesis of a number of xanthene dyes and to study their spectral properties; development of convenient methods for obtaining new types of N,S-amidoalkylating and related reagents with heterocumylene groups. Research methods are chemical synthesis, thin-layer chromatography (TLC), X-ray diffraction analysis (XRA), infrared spectroscopy (IR) and nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, ultraviolet spectroscopy (UV), mass spectrometry and quantum chemical calculations. Developed: The following methods are proposed for synthesizing a xanthene pH indicator, N-amidoalkylated derivatives of 2,5-diamino-1,3,4-thiadiazole, a xanthene-like pH indicator, and derivatives of 4,5,6,7-tetrahydrobenzofurans. The field of use of work results - C 21.10 production of basic pharmaceutical products, C 20.12 Production of dyes.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.835.867+547.854.3+547.757+547.556.92+547.556.93+547-386

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.27

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Метод синтезу ксантенового рН-індикатору

Назва продукції (англ): Synthesis method of xanthine pH indicator

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 20.12 – Виробництво барвників і пігментів, С 21.10 – Виробництво основних фармацевтичних продуктів.

Опис продукції (укр): Відповідно до створеного методу N'-(4-форміл-2,3-дигідро-1H-бензо[b]ксантен-12-іл)-N,N-

диметилімідоформамід (0.1 г, 1.5 ммоль) розчиняють у киплячому ізопропанолі (5 мл). Після охолодження до кімнатної температури додають 0.15 мл (3.0 ммоль) гідазин гідрату. Реакційну суміш залишають за кімнатної температури на 24 год. Осад, що утворюється, фільтрують і очищують кристалізацією з MeCN. Запропонований метод дозволяє отримати ксантеноподібний барвник з високим виходом. Цей барвник є селективним індикатором на кислотні агенти, які можуть знаходитись в розчині або повітрі. Розчин цього барвника в ацетонітрилі має червоний колір, а при додаванні кислоти змінює колір на яскраво-синій. Перевагою цього методу є можливість введення амідинової групи в молекулу, що забезпечує необхідні фотофізичні властивості. Одностадійний метод синтезу допомагає знизити витрати на виробництво, оскільки вихідні речовини доступні за ціною, а процес не потребує дорогого обладнання. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає. .

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів, Підвищення продуктивності праці

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: УДУНТ

Споживачі продукції: підприємства хімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна, країни Європи та Азії

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

НТП 2

Назва продукції (укр): Метод синтезу N-амідоалкілованих похідних 2,5-діаміно-1,3,4-тіадіазолу

Назва продукції (англ): Method for the synthesis of N-amidoalkylated derivatives of 2,5-diamino-1,3,4-thiadiazole

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 20.12 - Виробництво барвників і пігментів, С 21.10 - Виробництво основних фармацевтичних продуктів.

Опис продукції (укр): Відповідно до розробленого методу 10 ммоль амідоалкілованого похідного дітіобісечовини розчиняли в 20 мл ДМФА, до отриманого розчину при перемішуванні по краплях додавали розчин 11 ммоль (2.79 г) йоду і 30 ммоль (4.2 мл) триетиламіну в 15 мл ДМФА. Реакційну суміш залишали за кімнатної температури на 2 години. За цей час з реакційної суміші випадав осад сірки, який потім відокремлювали фільтруванням. Цільові похідні 1,3,4-тіадіазолу виділяли з фільтрату шляхом осадження 1% водним розчином тіосульфату натрію (250 мл). Осад, що випав, фільтрували, промивали 60 мл води і сушили. Продукт очищали перекристалізацією з ацетонітрилу. Розроблений метод дозволяє отримувати амідоалкіловані похідні 2,5-діаміно-1,3,4-тіадіазолу із виходами 80-90% і більш високого ступеня чистоти ніж ті методи і підходи, що використовувалися раніше. Всі отримані сполуки раніше були не відомі і містять в своєму складі унікальну комбінацію замісників із 1,3,4-тіадіазольним циклом. Застосування розробленого методу синтезу дозволить знизити собівартість виготовлення потенційних лікарських препаратів, оскільки вихідні речовини легкодоступні та метод не потребує високоартісного обладнання. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: УДУНТ

Споживачі продукції: підприємства хімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна, країни Європи та Азії

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

НТП 3

Назва продукції (укр): Метод синтезу похідних 4,5,6,7-тетрагідробензофуранів

Назва продукції (англ): Method for the synthesis of 4,5,6,7-tetrahydrobenzofurans derivatives

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 20.12 - Виробництво барвників і пігментів, С 21.10 - Виробництво основних фармацевтичних продуктів.

Опис продукції (укр): Реагент Вільсмайера-Хаака був отриманий шляхом поєднання POCl_3 (0,92 мл, 10 ммоль) і ДМФА (0,77 мл, 10 ммоль) у 25 мл круглодонну колбу при охолодженні льодом. Вихідні діоксолани (0,511 г, 3,3 ммоль) розчиняли в 1,78 мл (23 ммоль) ДМФ і додавали до реактиву Вільсмайера-Хаака. Реакційну суміш нагрівали зі зворотним холодильником, оснащений трубкою з хлоридом кальцію, на масляній бані при 80 °C протягом 4 годин. Потім реакційну суміш охолоджували до 10 °C, виливали на лід і обробляли 5% водним розчином NaHCO_3 у лужному середовищі. Похідні тетрагідробензофуранів фільтрували та очищали флеш-хроматографією на діоксиду кремнію, використовуючи CHCl_3 як елюент. Запропонований метод є новим та немає аналогів. Найбільш близькою синтетичною концепцією до запропонованого методу є термічне перегрупування похідних 4-бензоїлокси-1,3-діоксолану у присутності кислот або металкаталізована циклізація 2-(2-бромпроп-2-ен-1-іл)циклогексанону. Однак практична корисність цих методів обмежена багатоетапним синтезом, необхідним для синтетичних прекурсорів які, наприклад, вимагають 3-4 кроків. Запропонований метод дозволяє отримати фармакологічні продукти у 1 стадію. Додатковою перевагою є введення у фуранове кільце ортогонально галоген і альдегідну групу, які можуть слугувати білдінг-блоком. Запропонований метод синтезу є економічно ефективним завдяки спрощеному процесу, зменшенню витрат на реагенти та етапи синтезу, а також можливості багаторазового використання отриманих продуктів для подальших синтезів. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Економія матеріалів

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: УДУНТ

Споживачі продукції: підприємства хімічної промисловості, фармацевтичні компанії

Перспективні ринки: Україна, країни Європи та Азії

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

НТП 4

Назва продукції (укр): Спосіб отримання ксантиноподібного рН-індикатору

Назва продукції (англ): Method for the preparation of a xanthine-like pH indicator

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 20.12 - Виробництво барвників і пігментів, С 21.10 - Виробництво основних фармацевтичних продуктів.

Опис продукції (укр): N' -(4-форміл-2,3-дигідро-1H-бензо[b]ксантен-12-іл)-N,N-диметилімідоформамід (0.1 г, 1.5 ммоль) розчиняють у киплячому i-PrOH (5 мл), після охолодження до кімнатної температури додають 0.15 мл (3.0 ммоль) гідразин гідрату. Реакційну суміш залишають за кімнатної температури на 24 год. Осад, що випав, фільтрують і очищують кристалізацією із MeCN. Вихід 82%, червоно-коричневий порошок, Т пл. 250–252°C (розкл.). У представленому способі, згідно з винаходом, у ізопропиловому спирті з виходом 82% утворюється продукт, який містить у своєму складі амідіновий фрагмент. Ксантиноподібний рН-індикатор цікавий своєю реакцією на наявність незначних кількостей кислотних агентів у повітрі та воді. У розчині ацетонітрилу (концентрація 5-10-6 моль/л) проявляє максимум поглинання 508 нм (червоний колір). При додаванні одного еквіваленту кислоти або наявності у повітрі слідів кислотних речовин

максимум поглинання зміщується до 615 нм (яскраво-синій колір). Додавання триетиламіну до кислого розчину альдазину відновляє спектр нейтральної молекули. Технічною перевагою запропонованого способу є можливість введення у структуру амідинового фрагменту, наявність якого забезпечує бажані фотофізичні властивості. Одностадійний спосіб синтезу дозволить знизити собівартість продукції, оскільки вихідні речовини легкодоступні та проведення способу не потребує дорогоцінного обладнання. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: УДУНТ

Споживачі продукції: підприємства хімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: За договорами, Подано заявку на видачу охоронного документу

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. Varenichenko, S.A. Vilsmeier-Haack-Initiated Formylative Rearrangement of Spirodioxolan-5-ones into Functionalized 4,5,6,7-Tetrahydrobenzofurans / S.A. Varenichenko, V.I. Markov, J.F. Goebel, L.J. Goofsen, O.K. Farat. // J. Org. Chem. – 2024. – 89 (5). – P. 2840–2846. (<https://doi.org/10.1021/acs.joc.3c02042>).
2. Pavlova, V.V. Synthesis and spectral characteristics of N-(2,2,2-trichloro-1-((5-(R-amino)-1,3,4-thiadiazol-2-yl)amino)ethyl)carboxamides / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnii, A.B. Ryabitsky, V.V. Kiselev, O.V. Okhtina, A.V. Kharchenko // Synth. Commun. – 2024. – 54 (23). – P. 2076–2087. (<https://doi.org/10.1080/00397911.2024.2422472>).
3. Pavlova, V.V. Synthesis, spectral characteristics and molecular structure of N-(2,2,2-trichloro-1-(hydrazinecarbothioamido)ethyl)carboxamides / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnii, V.V. Kiselev, A.V. Kharchenko // Chem. Data Coll. – 2024. – 51. – 101137. (<https://doi.org/10.1016/j.cdc.2024.101137>).
4. Pavlova, V.V. Synthesis, spectral characteristics and molecular structure of N-(1-(5-amino-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-2,2,2-trichloroethyl)carboxamides / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnii, V.V. Kiselev // Struct. Chem. – 2024. – 35 – P. 1301-1306. (<https://doi.org/10.1007/s11224-024-02282-9>).
5. Lomynoha, Y.R. Synthesis of N-(1-((1H-perimidin-2-yl)amino)-2,2,2-trichloroethyl)carboxamides based on N-(2,2,2-trichloro-1-isothiocyanatoethyl)carboxamides / Y.R. Lomynoha, P.V. Zadorozhnii, A.B. Ryabitsky, V.V. Kiselev, A.V. Kharchenko // Synth. Commun. – 2024. – 54 (17). – P. 1470-1481. (<https://doi.org/10.1080/00397911.2024.2390178>).
6. Varenichenko, S.A. Novel xanthene-like dyes as pH indicators in acidic media / S.A. Varenichenko, A.V. Kovtun, O.K. Farat // Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2024. – 4. – P. 4-9. (<http://udhtu.edu.ua/public/userfiles/file/VHHT/2024/4/Varenichenko.pdf>).
7. Smetanin, N.V. Synthesis and in silico admet prediction of the properties of novel sulfonyl indole derivatives / N.V. Smetanin, S.A. Varenichenko, O.K. Farat // Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2024. – 3. – P. 171-178. (<http://udhtu.edu.ua/public/userfiles/file/VHHT/2024/3/Smetanin.pdf>).
8. Pavlova, V.V. Synthesis, spectral characteristics and molecular docking studies of N-(2,2,2-trichloro-1-(2-(phenylcarbamothioyl)hydrazine-1-carbothioamido)ethyl)cinnamamide as a potential analog of Salubrial / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnii, V.V. Kiselev, O.V. Okhtina, A.V. Kharchenko // Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2024. – 6. – P. 95-100. (<https://udhtu.edu.ua/public/userfiles/file/VHHT/2024/6/Pavlova.pdf>).
9. Varenichenko, S.A. Prediction of biological activity of aminoquinoline derivatives using the ADMET 2.0 web resource / S.A. Varenichenko, O.K. Farat // Український хімічний журнал. – 2024. – 1. – P. 15-25. (doi: 10.33609/2708-129X.90.1.2024.15-25).
10. Павлова, В.В. Синтез N-(2,2,2-трихлор-1-((5-(феніламіно)-1,3,4-тіадіазол-2-іл)аміно)етил)карбоксамідів / В.В. Павлова,

П.В. Задорожній, О.В. Харченко // Хімічні Каразінські читання – 2024: тези допов. XVI Всеукр. наук. конф. студ. та аспір. (Харків, 30 квітня 2024 р.). – Харків. – Р. 96.

11. Варениченко, С.А. ADMET характеристика 9-хлоропохідних-1Н-ксантен-4-карбальдегідів / С.А. Варениченко, О.К. Фарат // Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи: тези допов. VIII Всеукр. наук. конф. (Житомир, 1 травня 2024). – Житомир. – Р. 165-166.

12. Сметанін, М.В. Прогнозування біологічної активності полізаміщених похідних індолу / М.В. Сметанін, К.В. Залізна, С.А. Варениченко // Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів: тези допов. III Міжнар. наук. конф. (Дніпро, 20 травня 2024 р.). – Дніпро. – Р. 168-169.

13. Pavlova, V.V. Synthesis and transformations of dithiobiureas with N-(2,2,2-trichloroethyl)carboxamide fragment / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnyi, V.V. Kiselev, O.V. Okhtina, A.V. Kharchenko // XXVI Ukrainian Conference on Organic and Bioorganic Chemistry: mater. of XXVI Ukrainian Conference on Organic and Bioorganic Chemistry (Ужгород, 16-20 вересня 2024 р.). – Ужгород. – Д-41.

14. Varenichenko, S.A Novel methods of synthesys functionalized 4,5,6,7-tetrahydrobenzofurans / S.A. Varenichenko, O.K. Farat // XXVI Ukrainian Conference on Organic and Bioorganic Chemistry: mater. of XXVI Ukrainian Conference on Organic and Bioorganic Chemistry (Ужгород, 16-20 вересня 2024 р.). – Ужгород. – Д-61.

15. Заявка у 2024 04044 Україна, МПК C07C 241/02; C07D 311/92; C09K 109/00 Спосіб отримання ксантеноподібного рН-індикатору [Текст] / С.А. Варениченко, А.В. Ковтун, О.К. Фарат (Україна) ; заявник та патентовласник Український державний університет науки і технологій. – № у 2024 04044; заявл. 13.08.24.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 79

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Варениченко Світлана Анатоліївна (к. х. н., доц.)

Задорожній Павло Вікторович (к. х. н., доц.)

Ковтун Антон Володимирович (д.філософ)

Павлова Валерія Валеріївна

Свояков Ростислав Петрович

Сметанін Микола Вікторович (д.філософ)

Фарат Олег Костянтинович (д.х.н., доц.)

Керівник організації:

Сухий Костянтин Михайлович (д. т. н., професор)

Керівники роботи:

Фарат Олег Костянтинович (д. х. н.)

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.