Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0220U101509

Державний реєстраційний номер: 0119U100724

Відкрита

Дата реєстрації: 12-02-2020

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка методів синтезу нових N,O,S-гетероциклів

Початок етапу: 01-2019

Закінчення етапу: 12-2019

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02066747

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: проспект Гагаріна, 72, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Телефон: 0563749801

Телефон: 0563749822

E-mail: cdep@dnu.dp.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02066747

Адреса: проспект Гагаріна, 72, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 0563749801

Телефон: 0563749822

E-mail: cdep@dnu.dp.ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір з МОН, іншими центральними органами виконавчої влади

КПКВК: 2201020

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 675.1 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Конструювання N,O,S-вмісних гетероциклів із залученням нових каталітичних систем. Експериментальне та теоретичне дослідження

Назва роботи (англ)

Synthesis of N,O,S-containing heterocycles using new catalytic systems. An experimental and theoretical study

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження – синтез нових ансамблів N,O,S-гетероциклів, які включають різні комбінації азиридинів, пірролідинів, піперидинів, піранів, 1,3-оксазолідинів, 1,3-оксазолідин-2-онів, триазинохіназолінів, морфолінів та їх карбонілвмісних аналогів, а також 5-6 членних циклічних сульфонів. Мета роботи – розробка практично важливих каталітичних методологій синтезу N,O,S-гетероциклічних сполук у реакціях C-H активації, азиридинування аленів і споріднених систем, 1,3-диполярного циклоприєднання, а також мультикомпонентних циклоконденсацій за участю □-кетосульфонів та їх найближчих похідних. Методи дослідження – спектральні (ІЧ-спектроскопія, спектроскопія ЯМР 1H і 13C, мас-спектрометрія), квантово-хімічні, рентгеноструктурний аналіз. Вперше показано, що реакції вінільного нуклеофільного заміщення мічених дейтерієм біциклічних метиленазиридинів з вінілмагнійбромідом та диметилкупратом літію протікають відповідно до стереохімії SNVл механізму. Запропоновано метод синтезу метиленазиридиносечовин амінолізом 6-метилен-3-окса-1-азабіцикло[3.1.0]гексан-2-онів. Знайдено умови розширення біциклічної системи 3-окса-1-азабіцикло[3.1.0]гексан-2-онів до моноциклічної 5,6-дигідро-2H-1,3-оксазін-2-онової. Удосконалено методологію синтезу нових N,O,S-гетероциклів (похідних циклічних □-кетосульфонів, пірролідинів, тощо) за рахунок розробки нових каталітичних систем на основі органокаталізаторів та сполук перехідних металів. Отримані в роботі результати можуть бути застосованими для створення нових лікарських препаратів з цінними властивостями, а також для вирішення ряду задач теоретичної та експериментальної органічної хімії. Галузі застосування: синтетична органічна хімія, фармацевтична хімія, сільське господарство.

Реферат (англ)

Object of study - synthesis of new ansambles of N,O,S-heterocycles, which include different combinations of aziridines, pyrrolidines, piperidines, pyranes, 1,3-oxazolidines, 1,3-oxazolidin-2-ones, triazinoquinazolines, morpholines and their carbonyl-containing analogs, as well as 5-6 membered cyclic sulfones. The purpose of the work is the development of practically important catalytic methodologies for the synthesis of N,O,S-heterocyclic compounds in the reactions of C-H activation, aziridination of allenes and related systems, 1,3-dipolar cycloaddition, as well as multicomponent cyclocondensations of □-ketosulfones. Methods of study - spectral (IR-spectroscopy, 1H and 13C NMR spectroscopy, mass spectrometry), quantum-chemical, X-ray diffraction analysis. It has been shown for the first time that the reactions of vinyl nucleophilic substitution of deuterium-labeled bicyclic methylenaziridines with vinylmagnesium bromide and lithium dimethylcuprate proceed according to the stereochemistry of the SNVл mechanism. The method of synthesis of methylenaziridine ureas by the aminolysis of 6-methylene-3-oxa-1-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-ones is proposed. Conditions for expansion of 3-oxa-1-azabicyclo[3.1.0]hexane-2-ones to monocyclic 5,6-dihydro-2H-1,3-oxazin-2-ones were found. The methodology for the synthesis of new N,O,S-heterocycles (derivatives of cyclic □-ketosulfones, pyrrolidines, etc.) has been improved through the development of new catalytic systems based on organocatalysts and transition metal compounds. The results obtained can be used to create new drugs with valuable properties, as well as to solve a number of problems of theoretical and experimental organic chemistry. Areas of application: synthetic organic chemistry, pharmaceutical chemistry, agriculture.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547:544.424

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.27, 31.21.17

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Методи синтезу нових N,O,S-гетероциклічних похідних β-кетосульфонів

Назва продукції (англ): Methods for the synthesis of novel N,O,S-heterocyclic β-ketosulfone derivatives

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Медична та органічна хімія, сільське господарство

Опис продукції (укр): Розроблено методи синтезу нових N,O,S-гетероциклічних похідних на основі синтетично-доступних п'яти та шестичленних β-кетосульфонів. За рахунок залучення сучасних прийомів та методів органічної хімії, таких як каталіз сполуками перехідних металів, мультикомпонентний та однореакторний one-pot синтез, мікрохвильова та ультразвукова активація хімічних реакцій досягнуто високі виходи цільових продуктів. Особливості будови нових гетероциклічних похідних встановлено з використанням сучасних одно- та двовимірних методів ЯМР, а також рентгеноструктурного аналізу.

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

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: ДНУ

Споживачі продукції: комбінаторна та медична хімія, Інститут органічної хімії НАН України, м. Київ, Інститут біоорганічної та нафтохімії НАН України, м. Київ, Enamine Ltd., м. Київ, Укроргсинтез, м. Київ, Дніпровська медична академія, м. Дніпро, НТК «Інститут монокристалів» НАН України, м. Харків

Перспективні ринки: Естонія, Польща, Словаччина

Права інтелектуальної власності: Отримано патент

Форми та умови передачі продукції: Продаж патента

7. Бібліографічний опис

Sviatenko L.K. Role of singlet oxygen in the degradation of selected insensitive munitions compounds: a comprehensive, quantum chemical investigation/ L.K. Sviatenko, L. Gorb, D. Leszczynska, S.I. Okovytyy, M.K. Shukla, J. Leszczynski // J. Phys. Chem. A. – 2019. – V. 123, N 35. – P. 7597-7608. https://doi.org/10.1021/acs.jpca.9b01772

Shishkina S.V. The formation of the salt and neutral molecule cocrystal from equimolar solution of heliamine and bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-endo-2,3-dicarboxylic acid / S.V. Shishkina, I.A. Isaiev, V.V. Urzhuntseva, V.A. Palchykov // Acta Cryst. B. – 2019. – V. 75, N 2. – P. 192-200. https://doi.org/10.1107/S205252061900115X

Palchykov V.A. Recent progress in the synthesis of morpholines/ V.A. Palchykov, V.A. Chebanov // Chem. Heterocycl. Comp. – 2019. – V. 55, N 4-5. – P. 324-332. https://doi.org/10.1007/s10593-019-02461-1

Kozirev E.K. Thiopyran-3-one-1,1-dioxides in the synthesis of heterocycles / E.K. Kozirev, V.A. Palchykov // Chem. Heterocycl. Comp. – 2019. – V. 55, N 4-5. – P. 349-351. https://doi.org/10.1007/s10593-019-02463-z

Palchykov V. Synthesis and plant growth regulatory activity of 3-sulfolene derivatives / V. Palchykov, N. Khromykh, Y. Lykholat, S. Mykolenko, T. Lykholat // Chem. Chem. Tech. – 2019. – V. 13, N 4. – P. 424–428. https://doi.org/10.23939/chcht13.04.424

Пат. на винахід 120311 Україна, МПК8 C07D 335/02. Спосіб синтезу 3,4- і 3,6-дигідро-2Н-тіопіран-1,1-діоксидів / Козирєв Є.К., Чабаненко Р.М., Пальчиков В.О. // № a201800279. Заявл. 10.01.2018; Опубл. 11.11.2019; Бюл. № 21. – 4 с.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 78

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Коваленко Валерій Сергійович (к. х. н., доц.)

Лихолат Юрій Васильович (д. б. н., професор)

Пальчиков Віталій Олександрович (д. х. н., с.н.с.)

Феденко Володимир Савелійович (к. х. н., с.н.с.)

Хромих Ніна Олександрівна (к. б. н.)

Керівник організації:

Поляков Микола Вікторович (д. ф.-м. н., професор, член-кор.)

Керівники роботи:

Оковитий Сергій Іванович (д. х. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.