Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0217U004104

Державний реєстраційний номер: 0116U006678

Відкрита

Дата реєстрації: 13-01-2017

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Структурне керування напрямком реакції. Контрольований синтез як інноваційна основа хімічної технології

Початок етапу: 07-2016

Закінчення етапу: 12-2016

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05420735

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 02160, м. Київ, Харківське шосе, 50

Телефон: +38 044 559 6675

Телефон: +38 044 559 6686

E-mail: office.ipocc@nas.gov.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім.Л.М.Литвиненка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05420735

Адреса: Харківське шосе, 50, м. Київ, Київська обл., 02160, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445596675

Телефон: 380445596686

E-mail: office.ipocc@nas.gov.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: 2201040

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 130 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Структурне керування напрямком реакції. Контрольований синтез як інноваційна основа хімічної технології

Назва роботи (англ)

Structural control of the reaction direction. Controlled synthesis as the basis for innovative chemical technology

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження - гетарилзаміщені 5-амінопіразоли, гетарилзаміщені піразоло[3,4-c]ізохіноліни, їх синтез та реакції циклізації. Мета роботи - розробка методів синтезу піразоло[3,4-c]ізохінолінів з гетарильними замісниками у піридиновому та бензеновому ядрах; створення комплексу технічних рішень для виробництва сполук з протираковою та іншими видами активності. Методи дослідження - органічний синтез, ЯМР-, ІЧ-спектроскопія, тонкошарова та об'ємна хроматографія, молекулярний докінг. Опрацьовано препаративні методи синтезу 1- та 3-гетарил-4-(3,4-диметоксіфеніл)-5-амінопіразолів та їх відповідних галоїдпохідних. З використанням методології реакції Пікте-Шпенгера розроблено метод синтезу піразоло[3,4-c]ізохінолінів з гетероциклічними замісниками азинового ряду. Визначено відмінності реакційної здатності гетарильних естерів у реакції ацилювання арилацетонітрилів та запропоновано шляхи розвитку процесів циклізації амінопіразолів в межах сучасних уявлень реакції Шпенгера. Результати роботи можуть бути корисними в препаративній хімії гетероциклічних сполук - біологічноактивних субстанцій та розробки на їх основі нових лікарських засобів. Ключові слова 1,3-Ціанокетон, 4-арил-5-амінопіразол, циклізація, піразоло[3,4-C]ізохінолін, гетерильний замісник, ЯМР, протиракова активність

Реферат (англ)

Object of study - hetaryl sudstituted 5 aminopyrazoles, pyrazolo [3,4-c] isoquinolines, their synthesis and cyclization reactions. Aim of research - to develop methods for the synthesis of pyrazolo [3,4-c] isoquinoline with hetaryl substituents in pyridine and benzenovomu cores; creation of complex engineering solutions for the production of compounds with anti-cancer and other types of activity. Research methods - Organic synthesis, NMR, IR spectroscopy, thin layer chromatography and volume, molecular docking. Processed preparative methods of synthesis of 1- and 3-hetaryl-4- (3,4-dymetoksifenil) -5-aminopirazoliv and their respective haloyidpohidnyh. Using the methodology of response Pictet-Shpenhera the method of synthesis of pyrazolo [3,4-c] isoquinoline with heterocyclic substituents azynovoho series. Detected differences hetarylnyh esters reactivity in acylation reactions arylatsetonitryliv and the ways of cyclization aminopirazoliv processes within the modern ideas of Spengler reaction. The results may be useful in preparative chemistry of heterocyclic compounds - biologically substances and development on the basis of new medicines. Keywords Tsianoketon 1.3-4-aryl-5-aminopirazol, cyclization, pyrazolo [3,4-c] isoquinoline, heterylnyy substituent NMR anticancer activity

Індекс УДК: 547.8, 547.892.4/.8

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.27.07

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Регіоселективні методи введення гетероциклічних замісників у систему піразоло[3,4-c]ізохіноліну

Назва продукції (англ): Methods for regioselective introduction of substituents on the heterocyclic system pyrazolo[3,4-c] isoquinoline

Очікувані результати:

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

Опис продукції (укр): З використанням реакції Пікте-Шпенгера розроблено метод синтезу піразоло[3,4-c]ізохінолінів з гетероциклічними замісниками азинового ряду. Визначено відмінності реакційної здатності гетарильних естерів у реакції ацилювання арилацетонітрилів та запропоновано шляхи розвитку процесів циклізації амінопіразолів в межах реакції Шпенгера.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: Не визначено

Виробник продукції: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиененка НАН України

Споживачі продукції: науково-дослідні установи

Перспективні ринки: науково-дослідні установи, освітницькі установи

Права інтелектуальної власності: Наукові публікації

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. E.S. Sizonenko, I.K. Kobrakov, V.Y. Popov, S.Y. Suikov, S.LSynthesis of 2-R-2-(1-Aryl-7, 8-Dimethoxy-5H-2, 3-Benzodiazepin-4-yl) Acetic Acid Esters in the Eschenmoser Reaction // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga(SPRINGER) 49 (9), 1352-1357 (2013) 2. O. Kharaneko, V. Popov, S. Bogza4-Aryl-1-hydrazino-5 H-2, 3-benzodiazepine and 1-aryl-4-hydrazino-5 H-2, 3-benzodiazepine in the synthesis of condensed [1, 2] diazepines. // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga(SPRINGER) 49 (2), 317-324 (2013) 3. O.I. Kharaneko, S.L. BogzaNovel Strategy for the Synthesis of the Pyrrolo [3, 4-d][1, 2] diazepine Heterocyclic System // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga(SPRINGER) 48 (11), 1734-1735 (2013) 4. A.S. Tolkunov, V.N. Baumer, G.V. Palamarchuk, O.V. Shishkin, A.V. MazepaModification of the Pictet-Spengler reaction in the synthesis of fused 2, 3-benzodiazocines // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga(SPRINGER) 47 (8), 1006-1013 (2011) 5. Bogza S.L., Nikolaev O.S., Geleverya A.O., Gurtova K.VSynthesis of pyrimidine analogs homophtalic acid from dimethyl ester acetonedicarboxylate by the Biginelli reaction // Scientific notes of the Tauride National University of Vernadsky. Series Biology, Chemistry 26(4) 307-314 (2013) Tauride National University of Vernadsky 6. Харанеко О.И., Суйков С.Ю., Богза С.Л. Новые гетероциклические системы с 1,2-диазепиновым циклом // Материалы докладов XII научно-практического семинара и Координационного совета НАН Украины; Научные основы создания лекарственных средств". Гурзуф, 28-30.05. 2012.- с.56-64 7. S.Yu. Zinchenko, S.L. Bogza, S.Y. Sujkov, V.V. Pendyukh. HETEROANNELATED ISOQUINOLINES WITH STERICALLY HINDERED PHENOL CORE // Scientific notes of the Tauride National University of Vernadsky. Series Biology, Chemistry 26(4) 270-275 (2013) Tauride National University of Vernadsky 8. С. Л. Богза, И. К. Кобраков, В. Ю. Попов, Е. С. Сизоненко, С. Ю. Суйков1-АРИЛ-4-(2-ОКСОАЛКИЛ)ТИО-2,3(5Н)-БЕНЗОДИАЗЕПИНЫ В РЕАКЦИИ ЭШЕНМОЗЕРА // ВІСНИК Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Хімія (rus) 21(1026), вип.21(44) с.122-125 (2012). 9. С.Ю. Зінченко, І.К. Кобраков, В.Н. Кошелев, С.Л. Богза. СИНТЕЗ СПИРОПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛО- И ТИЕНО[3,4-С]ИЗОХИНОЛИНА // Вісник ДоННУ, серія А: Природничі науки 012, №2, с 115-119 10. С.Л. Богза. Новые гетероциклические системы для новых лекарств // Наука та інновації. вид. НАН України, Київ - 2015. - Т. 11, № 6. - С. 85-93.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 34

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік організацій-співвиконавців

Назва організації: Інститут органічної хімії НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Адреса: 02660, м.Київ-94, вул.Мурманська, 5

Підпорядкованість:

Перелік осіб-виконавців

Богдан Н.М.

Бондаренко О.В.

Бородкін Я.С.

Коваль Т.С.

Родигін М.Ю.

Суйков С.Ю.

Керівник організації:

Попов Анатолій Федорович

Керівники роботи:

Богза Сергій Леонідович (д. х. н., с.н.с.)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.