Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0222U001755

Державний реєстраційний номер: 0119U100724

Відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2022

1. Етапи виконання

Номер етапу: 3

Назва етапу: Біотестування синтезованих сполук

Початок етапу: 01-2021

Закінчення етапу: 12-2021

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02066747

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

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

Телефон: 380563749800

Телефон: 380563749850

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 Науки, буд. 72, Дніпро, Дніпровський User/address.short_district_ending, Дніпропетровська User/address.short_region_ending, 49045, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380563749801

Телефон: 380563749822

E-mail: cdep@dnu.dp.ua

WWW: https://www.dnu.dp.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

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 779.234 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, піррролідинів, 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, піррролідинів, 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. Сфера застосування: синтетична органічна хімія, фармацевтична хімія, сільське господарство.

Реферат (англ)

The object of study - the synthesis of new ensembles of N,O,S-heterocycles, which include various combinations of aziridines, pyrrolidines, piperidines, pyranes, 1,3-oxazolidines, 1,3-oxazolidin-2-ones, triazinoquinazolines, morpholines and their carbonyl analogues, as well as 5-6 membered cyclic sulfones. The aim of the work is to develop practically important catalytic methodologies for the synthesis of N,O,S-heterocyclic compounds in CH-activation reactions, aziridination of allenes and related systems, 1,3-dipolar cycloaddition, and multicomponent cyclocondensations with □-ketosulfones and their analogues. Research methods - spectral (IR spectroscopy, 1H and 13C NMR spectroscopy, mass spectrometry), quantum chemical calculations, X-ray diffraction analysis. It has been shown for the first time that vinyl nucleophilic substitution reactions of deuterium-labeled bicyclic methylene aziridines with vinylmagnesium bromide and lithium dimethylcuprate proceed according to the stereochemistry of the SNVл mechanism. A method for the synthesis of methyleneaziridineureas by aminolysis of 6-methylene-3-oxa-1-azabicyclo [3.1.0] hexan-2-ones has been proposed. The conditions for the expansion of the bicyclic system of 3-oxa-1-azabicyclo[3.1.0]hexan-2-ones to the monocyclic 5,6-dihydro-2H-1,3-oxazin-2-one were found. The methodology for the synthesis of new N,O,S-heterocycles (derivatives of cyclic □-ketosulfones, pyrrolidines, etc.) has been improved due to the development of new catalytic systems based on organocatalysts and transition metal compounds. The results obtained in this work 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. Scope: 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)

7. Бібліографічний опис

Visible Light-Induced Pd-Catalyzed Alkyl-Heck Reaction of Oximes / N. Kvasovs, V. Iziumchenko, V. Palchykov, V. Gevorgyan // ACS Catal. – 2021. – Vol. 11, № 6. – P. 3749-3754.

Nucleophilic Vinylic Substitution in Bicyclic Methylene Aziridines: SNVπ or SNV□? / Palchykov V., Dale P.C., Robertson J. // New J. Chem. – 2021. – Vol. 45, № 20. – P. 9020-9025. https://doi.org/10.1039/D1NJ01458G Impact factor: 3.591 (Scopus, Q1)

Targeting a Cryptic Pocket in a Protein-Protein Contact by Disulfide-Induced Rupture of a Homodimeric Interface / D. Nguyen, X. Xie, S. Jakobi, F. Terwesten, A. Metz, P. Nguyen, V. Palchykov, A. Heine, K. Reuter, G. Klebe // ACS Chem. Biol. – 2021. – Vol. 16, № 6. – P. 1090–1098. https://doi.org/10.1021/acschembio.1c00296 Impact factor: 5.100 (Scopus, Q1)

One-pot reactions of three-membered rings giving N,O,S-heterocycles / V.A. Palchykov, O. Zhurakovskyi // Adv. Het. Chem. – 2021. – Vol. 133. – P. 159-223. https://doi.org/10.1016/bs.aihch.2020.04.001 Impact factor: 4.313 (Scopus, Q1)

Stereoselective organocatalytic construction of spiro oxindole pyrrolidines using unsaturated □-ketoesters and □-ketoamides / T. Peňaška, V. Palchykov, E. Rakovský, G. Addová, R. Šebesta // Eur. J. Org. Chem. – 2021. – № 11. – P. 1693-1703. https://doi.org/10.1002/ejoc.202100022 Impact factor: 3.021 (Scopus, Q1)

Efficient approach for exploring the multiple-channel bimolecular interactions of conformationally flexible reagents. Epoxide ring opening reaction. Borysenko, I.O., Sviatenko, L.K., Okovytyy, S.I., Leszczynski, J. Structural Chemistry – 2021. – Vol. 32, № 2. – P. 581–589. https://doi.org/10.1007/s11224-020-01663-o

1,3-Amino alcohols and their phenol analogs in heterocyclization reactions (chapter 4) / V.A. Palchykov, A.A. Gaponov // Advances in Heterocyclic Chemistry (Ed.: Eric F.V. Scriven, Christopher A. Ramsden). Elsevier Inc., 2020, vol. 131, pp. 285-350. http://dx.doi.org/10.1016/bs.aihch.2019.06.001

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 153

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Борисенко Ірина Олександрівна (молодший науковий співробітник)

Вайнілович Ірина Вікторівна

Гапонов Олександр Олексійович (к. х. н., старший науковий співробітник)

Глушков Віталій Миколайович (д. ф.-м. н., професор)

Дідур Олег Олексійович (к. б. н., с.д.)

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

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

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

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

Святенко Людмила Костянтинівна (д. х. н., с.н.с.)

Сергеєва Тетяна Юріївна (д.філософ)

Стець Надія Вікторівна (к. х. н., доц.)

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

Хромих Ніна Олександрівна (к. б. н.)

Шевченко Людмила Василівна (к. х. н., доц.)

Юрко Ольга Юріївна

Керівник організації:

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

Керівники роботи:

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

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.