

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0223U005820

Державний реєстраційний номер: 0120U100309

Відкрита

Дата реєстрації: 31-12-2023



1. Етапи виконання

Номер етапу: 4

Назва етапу: Розробка методів синтезу аналогів аурону та ізофлавоноїдів з фармакофорними азагетеро-циклічними замісниками з метою одержання нових біологічно активних речовин.

Початок етапу: 01-2023

Закінчення етапу: 12-2023

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03563790

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Телефон: 380445599800

Телефон: 380445585388

E-mail: users@bpci.kiev.ua

WWW: <http://bpci.kiev.ua/>

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03563790

Адреса: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445599800

Телефон: 380445585388

E-mail: users@bpci.kiev.ua

WWW: <http://bpci.kiev.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: 6541030

Напрямок фінансування: 2.1 – фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 – кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 7692.739 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Спрямований синтез нових нітроген- та оксигенвмісних гетероциклічних сполук як низькомолекулярних біорегуляторів

Назва роботи (англ)

Directed synthesis of novel nitrogen- and oxygencontaining heterocyclic compounds as low molecular weight bioregulators.

Реферат (укр)

Розроблено ефективні методи синтезу піразоловмісних ауронів. Реакція бензофуран-3(2H)-онів з 1H-піразол-3(5)/4-карбоксальдегідами або 4-[(диметиламіно)-метиле́н]-2,4-дигідро-3H-піразол-3-онами протікає з утворенням 2-піразолілметиле́н-1-бензофуран-3(2H)-онів або 2-[(3(5)-гідрокси-1H-піразол-4-іл)метиле́н]-1-бензофуран-3(2H)-онів відповідно. Реакція 2-[(диметиламіно)метиле́н]-1-бензофуран-3(2H)-онів з 1-метил-5-амінопіразолами привела до утворення 2-[(5-аміно-1-метил-1H-піразол-4)-іл)метиле́н]-1-бензофуран-3(2H)-онів та 1-метил-1H-[1]бензофуро[3,2-b]піразоло[4,3-e]піридинів як міnorних продуктів. Розроблено простий метод синтезу п-(3(5)-трифторметилпіразол-5(3)-іл)-2-гідроксидеоксибензоїнів хемоселективною реакцією 2-(1,1,1-трифторацетоніл)хромонів з дигідрохлоридом гідразину. Цей підхід включає в себе початкову атаку гідразину по карбонільному атому групи CF₃C(O)CH₂ з наступним розкриттям хромонового кільця по атому C-2 і подальшу циклізацію до піразолів. Така синтетична стратегія забезпечує легкий доступ до нового типу фармацевтично привабливих гібридів 3-(трифторметил)піразол-деоксибензоїну з високими виходами.

Реферат (англ)

Effective methods for the synthesis of pyrazole-containing aurones have been developed. The reaction of benzofuran-3(2H)-ones with 1H-pyrazol-3(5)/4-carboxaldehydes or 4-[(dimethylamino)-methylene]-2,4-dihydro-3H-pyrazol-3-ones proceeds with the formation of 2-pyrazolylmethylene-1-benzofuran-3(2H)-ones or 2-[(3(5)-hydroxy-1H-pyrazol-4-yl)-methylene]-1-benzofuran-3(2H)-ones, respectively. The reaction of 2-[(dimethylamino)-methylene]-1-benzofuran-3(2H)-ones with 1-methyl-5-aminopyrazoles led to the formation of 2-[(5-amino-1-methyl-1H-pyrazol-4)-yl)methylene]-1-benzofuran-3(2H)-ones and 1-methyl-1H-[1]benzofuro[3,2-b]pyrazolo[4,3-e]pyridines as minor products. A simple method for the synthesis of п-(3(5)-trifluoromethylpyrazol-5(3)-yl)-2-hydroxydeoxybenzoin by chemoselective reaction of 2-(1,1,1-trifluoroacetyl)chromones with hydrazine dihydrochloride was developed. This approach includes the initial attack of hydrazine on the carbonyl atom of the CF₃C(O)CH₂ group followed by opening of the chromone ring on the C-2 atom and subsequent cyclization to pyrazoles. Such a synthetic strategy provides easy access to a new type of pharmaceutically attractive 3-(trifluoromethyl)pyrazole-deoxybenzoin hybrids in high yields.

Індекс УДК: 547.595, 547.64, 547.73, 547.8, 577.112;577.122;547.466;547.96, 577.127;547.973

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.21.15, 31.21.25.09, 31.21.27.05, 31.21.27.07, 31.23.27, 31.23.39

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Біологічно спрямована розробка зручних підходів до синтезу піразоловмісних ауронів та ізофлавоноїдів з фармакофорними азатетероциклічними замісниками.

Назва продукції (англ): Biologically oriented development of convenient approaches to the synthesis of pyrazole-containing aurones and isoflavonoids with pharmacophoric azaheterocyclic substituents.

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Установи НАН України та освіти, Охорона здоров'я, сільське господарство.

Опис продукції (укр): Розробка нових підходів до синтезу природних сполук та їх модифікація є перспективною стратегією пошуку нових ефективних лікарських засобів. Флавоноїди представляють клас природних сполук, що проявляють широкий спектр біологічної активності та досліджуються як перспективні скафолди для дизайну лікарських препаратів. Біологічна активність природних флавоноїдів та їх синтетичних аналогів включає антиоксидантну, антимікробну, протівірусну та протипухлинну. Аурони є мінорним класом флавоноїдних сполук. Незважаючи на те, що аурони складають невелику групу вторинних метаболітів, вони демонструють високий потенціал для терапії багатьох захворювань. Тому розробка методів синтезу невідомих раніше аналогів аурону та ізофлавоноїдів з фармакофорними азагетероциклічними замісниками є важливою як з теоретичної, так і з практичної точки зору.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 01.2023-12.2023

Виробник продукції: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України

Споживачі продукції: Установи НАН України та освіти, Міністерство охорони здоров'я, Міністерство аграрної політики та продовольства.

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: В Україні

Форми та умови передачі продукції: Статті, публікації

7. Бібліографічний опис

1. Myshko N. V., Mrug G. P., Kondratyuk K. M., Bondarenko S. P., Frasinyuk M. S. Coumarin-based homoisoflavonoids as precursors in the synthesis of 8-heteroaryl methylcoumarins. *Chem. Heterocycl. Compd.* 2023. Vol. 59, N 6/7. P. 456–464. <https://doi.org/10.1007/s10593-023-03216-9>
2. Chernykh A. V., Kudryk O. V., Olifir O. S., Dobrydnev A. V., Rusanov E., Moskvina V. S., Volochnyuk D. M., Grygorenko O. O. Expanding the chemical space of 1,2-difunctionalized cyclobutanes. *J. Org. Chem.* 2023. Vol. 88, N 5. P. 3109–3131. <https://doi.org/10.1021/acs.joc.2c02892>
3. Dibchak D., Snisarenko M., Mishuk A., Shablykin O., Bortnichuk L., Klymenko-Ulianov O., Kheylik Yu., Sadkova I., Rzepa H. S., Mykhailiuk P. K. General synthesis of 3-azabicyclo [3.1.1]heptanes and evaluation of their properties as saturated isosteres. *Angewandte Chemie.* 2023. Vol. 135, N 39. e202304246. <https://doi.org/10.1002/ange.202304246>
4. Shablykin O. V., Brovarets V. S., Shablykina O. V. Recyclization of 5-aminooxazoles as a route to new functionalized heterocycles (developments of V.P. Kukhar institute of bioorganic chemistry and petrochemistry of the NAS of Ukraine). *Chem. Record.* 2023. e202300264. <https://doi.org/10.1002/tcr.202300264>
5. Malets Ye. S., Golovchenko O. V. 2,2-Disubstituted 5- and 8-azachroman-4-ones: the effect on cancer growth in contrast to chromanone analogs. *UBA.* 2023. Vol. 18, N 1. P. 22–26.
6. Malets Ye. S., Vashchenko B. V., Moskvina V. S., Golovchenko O. V., Brovarets V. S., Grygorenko O. O. Parent 5(7)-azachromones and their partially hydrogenated derivatives: synthesis and physiochemical properties. *Chem. Heterocycl. Compd.* 2023. Vol. 59, N 6/7. P. 494–499.
7. Tsygankova V. A., Andreev A., Andrushevich Ya. V., Pilyo S. G., Brovarets V. S. Effect of plant growth regulators and fertilizers of the vegetative growth of sunflowers (*Helianthus annuus* L.). *Int. J. Heritage Stud.* 2023. N 116. P. 3–9.

8. Los O. V., Sinenko V. O., Kobzar O. L., Zhirnov V. V., Vovk A. I., Brovarets V. S. Synthesis and in vitro anticancer potential of new thiazole-containing derivatives of rhodanine. Chem. Het. Compd. 2023. Vol. 59, N 6/7. P. 484-493.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 82

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Іванова Ірина Володимирівна (к.х.н.)

Багрєєва Оксана Сергіївна

Бодачівський Юрій Станіславович (к. х. н.)

Бруснаков Михайло Юрійович

Велігіна Євгенія Сергіївна (к.х.н.)

Виджак Роман Миколайович (к.х.н., с.н.с.)

Герасимов Єгор Сергійович

Головченко Олександр Володимирович (к. х. н., с.д.)

Демидчук Богдан Андрійович (к.х.н.)

Жирнов Віктор Валентинович (д. мед. н., пров.н.с.)

Зябров Володимир Стефанович (к.х.н., с.н.с.)

Качаєва Марина Володимирівна

Качковський Олексій Дмитрович (д. х. н.)

Ключко Світлана Вікторівна (к.х.н.)

Козаченко Олександр Павлович (к.х.н.)

Кондратюк Костянтин Михайлович (к.х.н.)

Коноваленко Артем Сергійович

Лось Олександр Валентинович

Лютенко Наталія Василівна (к.х.н.)

Мітюхін Олег Петрович (к.х.н.)

Малець Єгор Сергійович

Мержиєвський Данило Олександрович

Москвіна Вікторія Сергіївна (к. х. н., с.н.с.)

Мруг Галина Петрівна (к.х.н.)

Пільо Степан Григорович (к.х.н., с.д.)

Панчишин Світлана Ярославівна (к.х.н.)

Порхун Світлана Василівна

Потіха Людмила Михайлівна (д. х. н., старший науковий співробітник)

Прокопенко Володимир Михайлович (к.х.н.)

Простота Ярослав Олександрович (к.х.н.)

Ренцевич Тетяна Леонідівна

Северін Олександр Олегович

Синенко Віталій Олегович (к. х. н.)

Сливчук Сергій Ростиславович (к.х.н.)

Соломянний Роман Миколайович

Фрасинюк Михайло Сергійович (к. х. н., с.н.с.)

Чумаченко Світлана Анатоліївна (к.х.н.)

Шабликін Олег Валентинович (к.х.н.)

Шабликіна Ольга Валентинівна (к. х. н.)

Керівник організації:

Вовк Андрій Іванович (д. х. н., професор, член-кор.)

Керівники роботи:

Броварець Володимир Сергійович (д. х. н., професор)

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.