Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0221U104306

Державний реєстраційний номер: 0119U100320

Відкрита

Дата реєстрації: 13-03-2021

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дослідження реакцій циклоприєднання в каталітичних умовах.

Початок етапу: 01-2020

Закінчення етапу: 12-2020

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070944

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Телефон: 380442393141

E-mail: nau_ch@mail.univ.kiev.ua

E-mail: rector@univ.net.ua

WWW: http://www.univ.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: просп. Перемоги, буд. 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.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: 1807.700 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Селективність у реакціях карбо-, гетероциклізації і функціоналізації для медичної хімії та сталого розвитку.

Назва роботи (англ)

Selectivity in the reactions of carbo-, heterocyclic and functionalization for medical chemistry and sustainable development.

Реферат (укр)

Об’єкт дослідження: гетероциклічні сполуки, в т.ч. нітрогеновмісні (ізоіндоли, конденсовані ізоіндоли, їх гетероаналоги, хіназолони, їх гетероаналоги, піридиновмісні амінокислоти, малеїн- і сукциніміди тощо) та оксигеновмісні (хромони та їх похідні, конденсовані оксигеновмісні системи з одним або двома гетероатомами тощо). Мета роботи: розробка сучасних селективних і препаративних синтетичних підходів до одержання нових молекул карбо- та гетероциклічної природи, а також їх подальша керована функціоналізація для медичної хімії та сталого розвитку. Методи дослідження: вивчення спектральними та комп'ютерними методами впливу різноманітних чинників, що визначають селективність досліджуваних реакцій карбо-, гетероциклізації та функціоналізації (каталізатор, розчинник, температура, електронна природа замісників, стеричні фактори тощо), дослідження спектрів флуоресценції. Встановлено вплив каталітичних умов та асиметричної індукції на перебіг реакції циклоприєднання. Досліджено реакцію циклізації аміноіміноізоіндолу з заміщеними орто-амінобензоатними кислотами, а також їх гетероаналогами. Вивчено особливості будови та фізико-хімічних властивостей одержаних сполук. Проведено модифікацію похідних хроманону, досліджено будови і властивості продуктів реакцій. Розроблено селективний препаративний метод синтезу оксадіазолів хроманонового ряду. Модифіковано синтетичні аналоги природних сполук залишками амінокислот. Синтезовано флуоресцентні зонди – похідні 3-гідроксифлавону, що здатні утворювати збільшену, у порівнянні з відомими аналогами, кількість водневих зв’язків, стекінг-взаємодій та дипольдипольних взаємодій, зокрема модифіковані у 4' положенні амінофлавоноли: 2[4-[біс(2-гідроксиетил)аміно]феніл]-3-гідрокси-4Н-1-бензопіран-4-он, 2-(4(біс(2-азидоетил)аміно)феніл)-3-гідрокси-4Н-хромен-4-он, 3-(4-(біс(2гідроксиетил)-аміно)феніл)-2-гідрокси-1Н-бензо[f]хромен-1-он, 3-(4-(біс(2азидоетил)аміно)-феніл)-2-гідрокси-1Н-бензо[f]хромен-1-он.

Реферат (англ)

Object of research: heterocyclic compounds, incl. nitrogen-containing (isoindoles, condensed isoindoles, their heteroanalogues, quinazolones, their heteroanalogues, pyridine-containing amino acids, maleic and succinimides, etc.) and oxygen-containing (chromones and their derivatives, condensed oxygen-containing systems, etc.) with one or two. Purpose: development of modern selective and preparative synthetic approaches to obtaining new molecules of carbo- and heterocyclic nature, as well as their further controlled functionalization for medical chemistry and sustainable development. Research methods: study by spectral and computer methods of influence of various factors that determine the selectivity of the studied reactions of carbo-, heterocyclization and functionalization (catalyst, solvent, temperature, electronic nature of substituents, steric factors, etc.), study of fluorescence spectra. The influence of catalytic conditions and asymmetric induction on the course of the cycloaddition reaction is established. The cyclization reaction of aminoiminoisoindole with substituted ortho-aminobenzoic acids, as well as their heteroanalogues, has been studied. The peculiarities of the structure and physicochemical properties of the obtained compounds are studied. Modification of chromanone derivatives is carried out, structures and properties of reaction products are investigated. A selective preparative method for the synthesis of oxadiazoles of the chromanon series has been developed. Synthetic analogues of natural compounds with amino acid residues have been modified. Fluorescent probes were synthesized - derivatives of 3-hydroxyflavone, which are able to form an increased, compared to known analogues, the number of hydrogen bonds, stacking interactions and dipoldipole interactions, in particular modified in the 4 'position aminoflavonols:

Індекс УДК: 547:544.18;547:544.16;547:544.12, 547:544.424, 547:544.42/.43, 547.595, 547.7/.8

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.15, 31.21.17, 31.21.18, 31.21.21.15, 31.21.27

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Сучасні селективні і препаративні синтетичні підходи

Назва продукції (англ): Modern selective and preparative synthetic approaches

Очікувані результати: Нові селективні реакції

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та разробки

Опис продукції (укр): Встановлено вплив каталітичних умов та асиметричної індукції на перебіг реакції циклоприєднання. Досліджено реакцію циклізації аміноіміноізоіндолу з заміщеними орто-амінобензоатними кислотами, а також їх гетероаналогами. Вивчено особливості будови та фізико-хімічних властивостей одержаних сполук. Проведено модифікацію похідних хроманону, досліджено будови і властивості продуктів реакцій. Розроблено селективний препаративний метод синтезу оксадіазолів хроманонового ряду. Модифіковано синтетичні аналоги природних сполук залишками амінокислот. Синтезовано флуоресцентні зонди – похідні 3-гідроксифлавону, що здатні утворювати збільшену, у порівнянні з відомими аналогами, кількість водневих зв'язків, стекінг-взаємодій та дипольдипольних взаємодій, зокрема модифіковані у 4' положенні амінофлавоноли: 2[4-[біс(2-гідроксиетил)аміно]феніл]-3-гідрокси-4Н-1-бензопіран-4-он, 2-(4(біс(2-азидоетил)аміно)феніл)-3-гідрокси-4Н-хромен-4-он, 3-(4-(біс(2гідроксиетил)-аміно)феніл)-2-гідрокси-1Н-бензо[f]хромен-1-он, 3-(4-(біс(2азидоетил)аміно)-феніл)-2-гідрокси-1Н-бензо[f]хромен-1-он. Вивчено взаємодію даних сполук з АТФ та селективність цієї взаємодії.

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: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 15; публікації в матеріалах конференцій, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 1; статті у журналах, що включені до переліку наукових фахових видань України - 2;

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 99

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Єгорова Тетяна Володимирівна (к.х.н., с.н.с.)

Івон Євген Миколайович

Бійцева Ангеліна Володимирівна (к. х. н., с.н.с.)

Бугера Олександра Ігорівна (к. х. н.)

Кисіль Андрій Іванович (к. х. н., н.с)

Крикун Сергій Олександрович (к. х. н.)

Левков Ігор Вікторович (к. х. н.)

Любчук Тетяна Володимирівна

Цапко Магдаліна Дмитрівна

Шилін Сергій Володимирович (к. х. н., н.с)

Керівник організації:

Жилінська Оксана Іванівна (д. е. н., професор)

Керівники роботи:

Войтенко Зоя Всеволодівна (д. х. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.