Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0215U000439

Державний реєстраційний номер: 0113U003187

Відкрита

Дата реєстрації: 24-02-2015

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Пошук шляхів та розробка методів одержання нових хіноїдних функціоналізованих похідних з нітрогено- та сульфуровмісними фрагментами, вивчення їх фізико-хімічних властивостей, комп'ютерний та експериментальний скринінг біологічної активності одержаних сполук

Початок етапу: 01-2014

Закінчення етапу: 12-2014

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Національний університет "Львівська політехніка"

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02071010

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: 79013, Україна, м.Львів, вул. С.Бандери, 12

Телефон: (032)2582025

Телефон: (032) 23750

E-mail: vinnichek@polynet.lviv.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00027677

Адреса: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 0442048428

E-mail: auek@ukr.net

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: 449.85 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Розробка теоретичних основ синтезу нових нітрогено- та сульфуровмісних сполук - потенційних субстанцій різної біологічної дії

Назва роботи (англ)

Development of the theoretical basis for the synthesis of new nitrogen- and sulfur-containing compounds - potential drug substances with various biological actions.

Реферат (укр)

Розроблено методи синтезу нових тіосульфонатних, сульфідних і гетероциклічних похідних, нових амінокислотних похідних нафтохінону з фрагментом екранованого фенолу і досліджено шляхи їх можливого практичного застосування. Шляхом селективного введення фармакофорних фрагментів як замісників у ядро гетероциклу розроблено зручні препаративні методики одержання нових хіназолінів, фенотіазинів, піримідинів та досліджено їх фізико-хімічні властивості. Досліджено різні шляхи введення тіосульфонатної групи в хіназолінові структури. Досліджено взаємодію 4-хлор-хіназоліну з алкіловими S-естерами 4-амінобензен-тіосульфокислоти з утворенням тіосульфонатних похідних. На основі одержаних результатів розроблено препаративні методики одержання естерів тіосульфокислот хіназоліну. Здійснено синтез нових сульфуро- та нітрогеновмісних похідних фенотіазину - дисульфіду, тіолу, сульфіду, тіосульфонату на основі фенотіазину та 2-хлорфенотіазину. На основі синтезованого тіосемікарбазонного похідного фенотіазину проведені реакції циклізації з утворенням тіазолінових похідних фенотіазину. Розроблено методи одержання ацилізотіоціанатів виходячи з синтезованих амінокислотних похідних 2,3-дихлоро-1,4-нафтохінону та вивчено їх фізико-хімічні властивості. Отримано нові потенційно біологічно активні сполуки шляхом взаємодії 3-хлоро-2-(3,5-ди-трет-бутил-4-гідроксифеніл)-1,4-нафтохінону з вторинними та первинними амінами, а також амінокислотами. Вивчено фізико-хімічні властивості синтезованих похідних хіноксаліну, фенотіазіну, нафтохінону, піримідину. Проведено комп'ютерний скринінг прогнозованої біологічної активності за програмою PASS для синтезованих сполук та виділено сполуки з найвищими показниками різних видів активності (бактерицидної, фунгіцидної, протиракової та ін.). Експериментальними біологічними дослідженнями виявлено високу антибактеріальну та фунгіцидну активності для деяких синтезованих сполук. За результатами дослідження впливу на мембранозв'язаних тирозинових протеїнкіназ виявлено сполуки, які є інгібіторами тирозинкіназ.

Реферат (англ)

The methods of synthesis of new thiosulfonate, sulfide and heterocyclic derivatives, new aminoacid derivatives of naphthoquinone with phenol screened moiety were developed and ways of possible practical applications were investigated. By selective introduction of pharmacophore fragments as substituents in the core of heterocycle, a convenient preparative methods of obtaining new quinazolines, phenothiazines, pyrimidines were developed and their physical and chemical properties were investigated. Different ways of thiosulfonate introduction in quinazoline structure were explored. Interaction of 4-chloroquinazoline with alkyl S-esters of 4-aminobenzen-thiosulfoacid with obtaining thiosulfonate derivatives was explored. On the basis of the received results preparative methods of obtaining thiosulfoacid esters of quinazoline were investigated. New sulfuro- and nitrogen-containing phenothiazine derivatives - disulfide, thiol, sulfide, thiosulfonate based on phenothiazine and 2- chlorophenothiazine were obtained. Based on synthesized thiosemicarbazone phenothiazine derivatives cyclization reaction with forming thiazoline derivatives of phenothiazine was carried out. Methods of obtaining acyl-isothiocyanates from synthesized aminoacid derivatives of 2,3-dichloro-1,4-naphthoquinone were developed and the their physical and chemical properties were studied. New potentially biologically active compounds were obtained by reacting of 3-chloro-2-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-1,4-naphthoquinone with secondary and primary amines and also aminoacids. Physicochemical

properties of the synthesized derivatives of quinoxaline, phenothiazine, naphthoquinone, pyrimidine were studied. A computer screening of predicted biological activity by program PASS for synthesized compounds was carried out and compounds with the highest rates of different types of activity (bactericidal, fungicidal, anticancer, etc.) were isolated. By experimental biological studies high antibacterial and fungicidal activity of some synthesized compounds were revealed. Results of the study on the influence of membrane-bound tyrosine kinase identified compounds that are inhibitors of tyrosine kinases.5481

Індекс УДК: 661.7, 661.7; 547.51; 547.269.1/.4

Коди тематичних рубрик НТІ: 61.37

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Розробка теоретичних основ синтезу нових нітрогено- та сульфуровмісних сполук - потенційних субстанцій різної біологічної дії

Назва продукції (англ): Development of the theoretical basis for the synthesis of new nitrogen- and sulfur-containing compounds - potential drug substances with various biological actions.

Очікувані результати:

Галузь застосування: 21.10 Виробництво основних фармацевтичних продуктів

Опис продукції (укр): Розроблено методи синтезу нових тіосульфонатних, сульфідних і гетероциклічних похідних, нових амінокислотних похідних нафтохінону з фрагментом екранованого фенолу і досліджено шляхи їх можливого практичного застосування. Шляхом селективного введення фармакофорних фрагментів як замісників у ядро гетероциклу розроблено зручні препаративні методики одержання нових хіназолінів, фенотіазинів, піримідинів та досліджено їх фізико-хімічні властивості.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: -

Виробник продукції: НУ "ЛП"

Споживачі продукції: хімія

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 99

Мова звіту: Українська

Умови поширення в Україні: Не заборонено

Умови передачі іншим країнам: Не заборонено

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Болібрух Х.Б.

Василюк С.В.

Карпенко О.Я.

Кархут А.І.

Ковальчук О.І.

Крвавич А.С.

Литвин Б.Я.

Лубенець В.І.

Монька Н.Я.

Новіков В.П.

Фігурка О.М.

Хом'як С.В.

Хоміцька Г.М.

Шиян Г.Б.

Яремкевич О.С.

Керівник організації:

Чухрай Наталія Іванівна

Керівники роботи:

Новіков Володимир Павлович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.