Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U002059

Державний реєстраційний номер: 0123U101168

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-02-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Теоретичне обґрунтування та синтетичне доведення можливостей нових доміно-реакцій.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Український державний університет науки і технологій

Код за ЄДРПОУ: 44165850

Місцезнаходження: вул. Лазаряна, буд. 2, м. Дніпро, Дніпровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380567765947

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1000.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові принципи синтезу флуоресцентних матеріалів та біологічно-активних N-, S-вмісних гетероциклів.

Назва роботи англійською:

New principles of synthesis of fluorescent materials and biologically active N,S-containing heterocycles.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – NIR (Near InfraRed)-флуоресцентні барвники, фотоелементи для сонячних батарей та оптичні фільтри, а також N,S-альфа-амідоалкілування та споріднені процеси для створення функціоналізованих гетероциклічних систем – потенційних фармсубстанцій. Мета роботи – визначення оптимальних умов синтезу низки ксантенових барвників та дослідження їх спектральних властивостей; розробка зручних методів одержання нових типів N,S-амідоалкілюючих та споріднених реагентів з гетерокумуленовими угрупованнями. Методи дослідження – хімічний синтез, тонкошарова хроматографія (ТШХ), рентгеноструктурний аналіз (РСА), інфрачервона спектроскопія (ІЧ-) та ядерний магнітний резонанс (ЯМР)-спектроскопія, ультрафіолетова спектроскопія (УФ), мас-спектрометрія та квантово-хімічні розрахунки. Розроблено: Метод синтезу ксантенового pH-індикатору, метод синтезу N-амідоалкілованих похідних 2,5-диаміно-1,3,4-тіадіазолу, спосіб отримання ксантеноподібного pH-індикатору та метод синтезу похідних 4,5,6,7-тетрагідробензофуранів. Галузь використання результатів роботи – С 21.10 виробництво основних фармацевтичних продуктів, С 20.12 Виробництво барвників.

Реферат англійською:

The object of research is NIR (Near InfraRed)-fluorescent dyes, photocells for solar cells and optical filters, as well as N,S-alpha-amidoalkylation and related processes for the creation of functionalized heterocyclic systems - potential pharmaceutical substances. The purpose of the work is to determine the optimal conditions for the synthesis of a number of xanthene dyes and to study their spectral properties; development of convenient methods for obtaining new types of N,S-amidoalkylating and related reagents with heterocumulene groups. Research methods are chemical synthesis, thin-layer chromatography (TLC), X-ray diffraction analysis (XRA), infrared spectroscopy (IR) and nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, ultraviolet spectroscopy (UV), mass spectrometry and quantum chemical calculations. Developed: The following methods are proposed for synthesizing a xanthene pH indicator, N-amidoalkylated derivatives of 2,5-diamino-1,3,4-thiadiazole, a xanthene-like pH indicator, and derivatives of 4,5,6,7-tetrahydrobenzofurans. The field of use of work results - C 21.10 production of basic pharmaceutical products, C 20.12 Production of dyes.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.835.867+547.854.3+547.757+547.556.92+547.556.93+547-386

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Фарат Олег Костянтинович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Метод синтезу ксантенового pH-індикатору

Назва НТП англійською: Synthesis method of xanthine pH indicator

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 20.12 - Виробництво барвників і пігментів, С 21.10 - Виробництво основних фармацевтичних продуктів.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Відповідно до створеного методу N'-(4-форміл-2,3-дигідро-1H-бензо[b]ксантен-12-іл)-N,N-диметилімідоформамід (0.1 г, 1.5 ммоль) розчиняють у киплячому ізопропанолі (5 мл). Після охолодження до кімнатної температури додають 0.15 мл (3.0 ммоль) гідразин гідрату. Реакційну суміш залишають за кімнатної температури на 24 год. Осад, що утворюється, фільтрують і очищують кристалізацією з MeCN. Запропонований метод дозволяє отримати ксантеноподібний барвник з високим виходом. Цей барвник є селективним індикатором на кислотні агенти, які можуть знаходитись в розчині або повітрі. Розчин цього барвника в ацетонітрилі має червоний колір, а при додаванні кислоти змінює колір на яскраво-синій. Перевагою цього методу є можливість введення амідинової групи в молекулу, що забезпечує необхідні фотофізичні властивості. Одностадійний метод синтезу допомагає знизити витрати на виробництво, оскільки вихідні речовини доступні за ціною, а процес не потребує дорогого обладнання. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає. .

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів, Підвищення продуктивності праці

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:**
- **Закінчення етапу:**

Споживачі продукції: підприємства хімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна, країни Європи та Азії

Характер співробітництва з інвестором

- **Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:** 0
- **Права, що надаються інвестору після завершення роботи:** Права не надаються
- **Наявність бізнес-плану:** Ні
- **Техніко-економічне обгрунтування:** Ні
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:** 0
- **Очікуваний термін окупності (років):** 0
- **Додаткова інформація:**

Назва НТП українською:Метод синтезу N-амідоалкілованих похідних 2,5-диаміно-1,3,4-тіадіазолу

Назва НТП англійською: Method for the synthesis of N-amidoalkylated derivatives of 2,5-diamino-1,3,4-thiadiazole

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 20.12 - Виробництво барвників і пігментів, С 21.10 - Виробництво основних фармацевтичних продуктів.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Відповідно до розробленого методу 10 ммоль амідоалкілованого похідного дітіобісечовини розчиняли в 20 мл ДМФА, до отриманого розчину при перемішуванні по краплях додавали розчин 11 ммоль (2.79 г) йоду і 30 ммоль (4.2 мл) триетиламіну в 15 мл ДМФА. Реакційну суміш залишали за кімнатної температури на 2 години. За цей час з реакційної суміші випадав осад сірки, який потім відокремлювали фільтруванням. Цільові похідні 1,3,4-тіадіазолу виділяли з фільтрату шляхом осадження 1% водним розчином тіосульфату натрію (250 мл). Осад, що випав, фільтрували, промивали 60 мл води і сушили. Продукт очищали перекристалізацією з ацетонітрилу. Розроблений метод дозволяє отримувати амідоалкіловані похідні 2,5-диаміно-1,3,4-тіадіазолу із виходами 80-90% і більш високого ступеня чистоти ніж ті методи і підходи, що використовувалися раніше. Всі отримані сполуки раніше були не відомі і містять в своєму складі унікальну комбінацію замісників із 1,3,4-тіадіазольним циклом. Застосування розробленого методу синтезу дозволить знизити собівартість виготовлення потенційних лікарських препаратів, оскільки вихідні речовини легкодоступні та метод не потребує високовартісного обладнання. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:**
- **Закінчення етапу:**

Споживачі продукції: підприємства хімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна, країни Європи та Азії

Характер співробітництва з інвестором

- **Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:** 0
- **Права, що надаються інвестору після завершення роботи:** Права не надаються
- **Наявність бізнес-плану:** Ні
- **Техніко-економічне обгрунтування:** Ні
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:** 0
- **Очікуваний термін окупності (років):** 0
- **Додаткова інформація:**

Назва НТП українською: Метод синтезу похідних 4,5,6,7-тетрагідробензофуранів

Назва НТП англійською: Method for the synthesis of 4,5,6,7-tetrahydrobenzofurans derivatives

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 20.12 - Виробництво барвників і пігментів, С 21.10 - Виробництво основних фармацевтичних продуктів.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Реагент Вільсмайєра-Хаака був отриманий шляхом поєднання POCl3 (0,92 мл, 10 ммоль) і ДМФА (0,77 мл, 10 ммоль) у 25 мл круглодонную колбу при охолодженні льодом. Вихідні діоксолани (0,511 г, 3,3 ммоль) розчиняли в 1,78 мл (23 ммоль) ДМФ і додавали до реактиву Вільсмайєра-Хаака. Реакційну суміш нагрівали зі зворотним холодильником, оснащений трубкою з хлоридом кальцію, на масляній бані при 80 °C протягом 4 годин. Потім реакційну суміш охолоджували до 10 °C, виливали на лід і обробляли 5% водним розчином NaHCO3 у лужному середовищі. Похідні тетрагідробензофуранів фільтрували та очищали флеш-хроматографією на діоксиду кремнію, використовуючи CHCl3 як елюент. Запропонований метод є новим та немає аналогів. Найбільш близькою синтетичною концепцією до запропонованого методу є термічне перегрупування похідних 4-бензоїлокси-1,3-діоксолану у присутності кислот або металкаталізована циклізація 2-(2-бромпроп-2-ен-1-іл)циклогексанону. Однак практична корисність цих методій обмежена багатоетапним синтезом, необхідним для синтетичних прекурсорів які, наприклад, вимагають 3-4 кроків. Запропонований метод дозволяє отримати фармакологічні продукти у 1 стадію. Додатковою перевагою є введення у фуранове кільце ортогонально галоген і альдегідну групу, які можу слугувати білдінг-блоком. Запропонований метод синтезу є економічно ефективним завдяки спрощеному процесу, зменшенню витрат на реагенти та етапи синтезу, а також можливості багаторазового використання отриманих продуктів для подальших синтезів. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:**
- **Закінчення етапу:**

Споживачі продукції: підприємства хімічної промисловості, фармацевтичні компанії

Перспективні ринки: Україна, країни Європи та Азії

Характер співробітництва з інвестором

- **Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:** 0
- **Права, що надаються інвестору після завершення роботи:** Права не надаються
- **Наявність бізнес-плану:** Ні
- **Техніко-економічне обгрунтування:** Ні
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:** 0

Очікуваний термін окупності (років):0

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Спосіб отримання ксантеноподібного pH-індикатору

Назва НТП англійською: Method for the preparation of a xanthine-like pH indicator

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 20.12 - Виробництво барвників і пігментів, С 21.10 - Виробництво основних фармацевтичних продуктів.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: N'-(4-форміл-2,3-дигідро-1H-бензо[b]ксантен-12-іл)-N,N-диметилімідоформамід (0.1 г, 1.5 ммоль) розчиняють у киплячому i-PrOH (5 мл), після охолодження до кімнатної температури додають 0.15 мл (3.0 ммоль) гідразин гідрату. Реакційну суміш залишають за кімнатної температури на 24 год. Осад, що випав, фільтрують і очищують кристалізацією із MeCN. Вихід 82%, червоно-коричневий порошок, Т пл. 250–252°С (розкл.). У представленому способі, згідно з винаходом, у ізопропиловому спирті з виходом 82% утворюється продукт, який містить у своєму складі амідиновий фрагмент. Ксантеноподібний pH-індикатор цікавий своєю реакцією на наявність незначних кількостей кислотних агентів у повітрі та воді. У розчині ацетонітрилу (концентрація 5·10-6 моль/л) проявляє максимум поглинання 508 нм (червоний колір). При додаванні одного еквіваленту кислоти або наявності у повітрі слідів кислотних речовин максимум поглинання зміщується до 615 нм (яскраво-синій колір). Додавання триетиламіну до кислого розчину альдазину відновляє спектр нейтральної молекули. Технічною перевагою запропонованого способу є можливість введення у структуру амідинового фрагменту, наявність якого забезпечує бажані фотофізичні властивості. Одностадійний спосіб синтезу дозволить знизити собівартість продукції, оскільки вихідні речовини легкодоступні та проведення способу не потребує дорогоцінного обладнання. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства хімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років):0

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Varenichenko, S.A. Vilsmeier–Haack-Initiated Formylative Rearrangement of Spirodioxolan-5-ones into Functionalized 4,5,6,7-Tetrahydrobenzofurans / S.A. Varenichenko, V.I. Markov, J.F. Goebel, L.J. Gooßen, O.K. Farat. // J. Org. Chem. – 2024. – 89 (5). – P. 2840–2846. (https://doi.org/10.1021/acs.joc.3c02042).

2. Pavlova, V.V. Synthesis and spectral characteristics of N-(2,2,2-trichloro-1-((5-(R-amino)-1,3,4-thiadiazol-2-yl)amino)ethyl)carboxamides / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnii, A.B. Ryabitsky, V.V. Kiselev, O.V. Okhtina, A.V Kharchenko // Synth. Commun. – 2024. – 54 (23). – P. 2076–2087. (https://doi.org/10.1080/00397911.2024.2422472).

3. Pavlova, V.V. Synthesis, spectral characteristics and molecular structure of N-(2,2,2-trichloro-1-(hydrazinecarbothioamido)ethyl)carboxamides / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnii, V.V. Kiselev, A.V Kharchenko // Chem. Data Coll. – 2024. – 51. – 101137. (https://doi.org/10.1016/j.cdc.2024.101137).

4. Pavlova, V.V. Synthesis, spectral characteristics and molecular structure of N-(1-(5-amino-1H-1,2,4-triazol-1-yl)-2,2,2-trichloroethyl)carboxamides / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnii, V.V. Kiselev // Struct. Chem. – 2024. – 35 – P. 1301-1306. (https://doi.org/10.1007/s11224-024-02282-9).

5. Lomynoha, Y.R. Synthesis of N-(1-((1H-perimidin-2-yl)amino)-2,2,2-trichloroethyl)carboxamides based on N-(2,2,2-trichloro-1-isothiocyanatoethyl)carboxamides / Y.R. Lomynoha, P.V. Zadorozhnii, A.B. Ryabitsky, V.V. Kiselev, A.V Kharchenko // Synth. Commun. – 2024. – 54 (17). – P. 1470-1481. (https://doi.org/10.1080/00397911.2024.2390178).

6. Varenichenko, S.A. Novel xanthene-like dyes as pH indicators in acidic media / S.A. Varenichenko, A.V. Kovtun, O.K. Farat // Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2024. – 4. – P. 4-9. (http://udhtu.edu.ua/public/userfiles/file/VHHT/2024/4/Varenichenko.pdf).

7. Smetanin, N.V. Synthesis and in silico admet prediction of the properties of novel sulfonyl indole derivatives / N.V. Smetanin, S.A. Varenichenko, O.K. Farat // Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2024. – 3. – P. 171-178. (http://udhtu.edu.ua/public/userfiles/file/VHHT/2024/3/Smetanin.pdf).

8. Pavlova, V.V. Synthesis, spectral characteristics and molecular docking studies of N-(2,2,2-trichloro-1-(2-(phenylcarbamothioyl)hydrazine-1-carbothioamido)ethyl)cinnamamide as a potential analog of Salubrinal / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnii, V.V. Kiselev, O.V. Okhtina, A.V. Kharchenko // Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2024. – 6. – P. 95-100. (https://udhtu.edu.ua/public/userfiles/file/VHHT/2024/6/Pavlova.pdf).

9. Varenichenko, S.A. Prediction of biological activity of aminoquinoline derivatives using the ADMET 2.0 web resource / S.A. Varenichenko, O.K. Farat // Український хімічний журнал. – 2024. – 1. – P. 15-25. (doi: 10.33609/2708-129X.90.1.2024.15-25).

10. Павлова, В.В. Синтез N-(2,2,2-трихлор-1-((5-(феніламіно)-1,3,4-тіадіазол-2-іл)аміно)етил)карбоксамідів / В.В. Павлова, П.В. Задорожній, О.В. Харченко // Хімічні Каразінські читання – 2024: тези допов. XVI Всеукр. наук. конф. студ. та аспір. (Харків, 30 квітня 2024 р.). – Харків. – P. 96.

11. Вареніченко, С.А. ADMET характеристика 9-хлоропохідних-1H-ксантен-4-карбальдегідів / С.А. Вареніченко, О.К. Фарат // Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи: тези допов. VIII Всеукр. наук. конф. (Житомир, 1 травня 2024). – Житомир. – P. 165-166.

12. Сметанін, М.В. Прогнозування біологічної активності полізаміщених похідних індолу / М.В. Сметанін, К.В. Залізна, С.А. Вареніченко // Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів: тези допов. III Міжнар. наук. конф. (Дніпро, 20 травня 2024 р.). – Дніпро. – P. 168-169.

13. Pavlova, V.V. Synthesis and transformations of dithiobiureas with N-(2,2,2-trichloroethyl)carboxamide fragment / V.V. Pavlova, P.V. Zadorozhnii, V.V. Kiselev, O.V. Okhtina, A.V. Kharchenko // XXVI Ukrainian Conference on Organic and Bioorganic Chemistry: mater. of XXVI Ukrainian Conference on Organic and Bioorganic Chemistry (Ужгород, 16-20 вересня 2024 р.). – Ужгород. – Д-41.

14. Varenichenko, S.A Novel methods of synthesys functionalized 4,5,6,7-tetrahydrobenzofurans / S.A. Varenichenko, O.K. Farat // XXVI Ukrainian Conference on Organic and Bioorganic Chemistry: mater. of XXVI Ukrainian Conference on Organic and Bioorganic Chemistry (Ужгород, 16-20 вересня 2024 р.). – Ужгород. – Д-61.

15. Заявка u 2024 04044 Україна, МПК C07C 241/02; C07D 311/92;C09K 109/00 Спосіб отримання ксантеноподібного pH-індикатору [Текст] / С.А. Варениченко, А.В. Ковтун, О.К. Фарат (Україна) ; заявник та патентовласник Український державний університет науки і технологій. – № u 2024 04044; заявл. 13.08.24.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Сухий Костянтин Михайлович, д. т. н., 02.00.06, 05.17.06

Перелік осіб-виконавців

Варениченко Світлана Анатоліївна
(к. х. н., 02.00.03)

Задорожній Павло Вікторович
(к. х. н., 02.00.03)

Ковтун Антон Володимирович
(д.філософ)

Павлова Валерія Валеріївна

Свояков Ростислав Петрович

Сметанін Микола Вікторович
(д.філософ, 102)

Фарат Олег Костянтинович
(д.х.н., 02.00.03)

Відповідальний за підготовку облікових документів — Архипова В.В.

Телефон — +38 (099) 265-76-24

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності