

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0215U004512

**Державний реєстраційний номер:** 0111U006259

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 28-05-2015

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 4

**Назва етапу:** Перетворення на основі нітроген- та оксигенвмісних гетероциклів, літературний огляд щодо можливостей практичного використання синтезованих продуктів

**Початок етапу:** 01.2014

**Закінчення етапу:** 12.2014

**Вид звітнього документа:** Проміжний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Київський національний університет імені Тараса Шевченка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 526-21-29

## 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:** просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 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)

**Напрямок фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 2201290

|                                                       |
|-------------------------------------------------------|
| <b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 1372 |
|-------------------------------------------------------|

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Нові гетероциклічні сполуки – ефективні джерела біологічно-активних речовин, флуоресцентних зондів, модифікаторів супрамолекулярних об'єктів

### Назва роботи англійською:

New heterocyclic compounds – effective sources of biologically-active substances, fluorescent probes, modifiers of supramolecular objects

### Реферат українською:

Звіт про НДР: 97 с., 110 рис., 4 табл., 1 додаток, 30 джерел. Об'єкт дослідження: нітроген-, кисисген- та сульфурвмісні гетеросистеми. Мета роботи: розробка та вдосконалення препаративних методів та методик синтезу нових гетероциклічних сполук для створення нових біорегуляторів широкого спектру дії, нових фоточутливих та флуоресцентних матеріалів. Методи дослідження: методи синтезу модельних органічних сполук, гетероциклічних сполук; ЯМР-, ІЧ-, УФ-, флуоресцентна спектроскопія; мас- та хроматомас-спектрометрія; методи синтезу під високим тиском та в інертній атмосфері; рентгеноструктурний та елементний аналіз. Розроблено методи синтезу похідних 1,4-бензотіазепінів, 2Н-1,5-бензоксатієпінів, 5Н-4,1-бензоксатієпінів та методи їх функціоналізації на основі реакцій окиснення, відновлення, Вільсмайєра, з ДМФАДМА, бромом, з нуклеофілами та електрофілами, реакції Штрекера, Корі – Чайковського, Хорнера – Водсворта – Еммонса, та умови їх перегрупування. Розроблено новий підхід до синтезу похідних 1,2,8-тріазаспіро[4.5]декану. Визначено, за даними *in silico* скринінгу, будову найперспективніших сполук для подальшого синтезу – похідних піролідін-2,5-діону. Знайдено та оптимізовано умови синтезу 3-гетерилзаміщених піролідін-2,5-діонів, біс-адуктів Міхаєля в реакціях 2-амінопіридинів та 2-амінотіазолу з малеїнімідами, 3-(9Н-флуорен-9-іл)піролідін-2,5-діону, похідних 3-флуоренсукциниміду. Розроблено методи синтезу ряду нових синтетичних амінокислот, сульфамідів та амінометильних похідних 3-арилізокумарину, похідних 3-гетарилізокумаринів та показана можливість їх трансформації в ізохінолони та конденсовані системи, 6-(ізокумарин-3-іл)-4-алкілumbеліферону, ряду аналогів гравеолону, піранонеофлавонів, 2Н-хромен-2-ону та запропоновано їх використання в якості флуоресцентних зондів, гетероаналогів 2-іміно-3-гетарилкумаринів, 3-гетарилхромонів. Проведена функціоналізація кумаринів залишками алкалоїдів та ізофлавонів залишками глікозидів. Досліджено біологічну активність похідних 3-азолілхромонів, синтетичних похідних хромана, імідазо(тіазоло)піразолопіримідину. Розроблена проста процедура синтезу піразоло[3,4-*d*]-4,5-дигідропіримідинів та їх конденсованих похідних. Результати НДР впроваджено: в навчальний процес хімічного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

### Реферат англійською:

Report : 101 p., 110 pict., 6 tabl., 1 addition, 53 references. Research object: nitrogen-, oxygen- and sulfurcomprising geterosystems. Work aim: The development and improvement of preparative methodes and methodics of synthesis of novel geterocyclic compounds for making of novel bioregulators of widesread-spectrum of range, novel photosensitive and fluorescent materials. Research methodes: Methodes of synthesis of model organic substances, geterocyclic substances; NMR-, IR-, UV-, fluorescent spectroscopy; mass- and chromatomass-spectroscopy; methodes of synthesis under high pressure and inert atmosphere; XR- and elemental analysis. The synthetic methodes of 1,4-benzothiazepines, 2H-1,5-benzoxathiepies, 5H-4,1-benzoxathiepies and methods of their functionalization through oxidation , saturation, Vilsmeier, with DMFADMA,bromine, with electrophiles and nucleophiles, Strecker, Corey – Chaykovsky, Horner – Wadsworth – Emmons reactions, and rearrangement conditions were developed. A new approach to the synthesis of 1,2,8-triazaspiro[4.5]decane derivatives was developed. The structure of the most promising compounds for further synthesis – pyrrolidin-2,5-dione

derivatives was determined according to in silico screening. The synthetic conditions of 3-hetaryl substituted pyrrolidin-2,5-diones, Michael bis-adducts in the reactions of 2-aminopyridines and 2-aminothiazole with maleimides, 3-(9H-fluoren-9-yl)pyrrolidin-2,5-dione, 3-fluoren-pyrrolidin-2,5-dione were found and optimized. A new approach to the synthesis of several new synthetic amino acids, sulfamides and aminomethyl-3-arylisocoumarine derivatives, 3-hetarylisocoumarine derivatives was developed; the possibility of transformation into isoquinolines and condensed systems of 6-(isocoumarin-3-yl)-4-alkyl-umbelliferone of them; new methods of synthesis of several graveolone analogues, pyranoneoflavones, 2H-chromen-2-one was developed and the use of 2-imino-3-hetarylcoumarine, 3-hetarylchromone heteroanalogs as fluorescent probes was showed and suggested. The functionalization of coumarines with alkaloids remains and isoflavone glycoside residues was conducted. The biological activity of 3-azolychromone, synthetic chromane, imidazo(thiazolo)pyrazolopyrimidine derivatives was investigated. A simple synthesis procedure of pyrazolo[3,4-d]-4,5-dihydropyrimidines and their condensed derivatives was developed. The results of SRW were applied: into subjects of Chemical department of Taras Shevchenko National University of Kyiv.

**Індекс УДК:** 547, 547.466:546.16; 547.747:544.122.4; 547.814+547.816; 547.759+547.745+541.61; 547.869; 547.833.6+547.856.1

**Коди тематичних рубрик:** 31.21

**Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Хиля Володимир Петрович

**Науковий ступінь:**

**Вчене звання:**

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Цільові методи синтезу конденсованих гетероциклічних систем

**Назва НТП англійською:** Target methods of synthesis of condensed heterocyclic systems

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** методики

**Галузь застосування:** хімія, біологія, медицина

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Розробка та вдосконалення препаративних методів та методик синтезу нових гетероциклічних сполук для створення нових біорегуляторів широкого спектру дії, нових фоточутливих та флуоресцентних матеріалів; синтезовано похідні нової 1,4-бензотіазепінів, 2Н-1,5-бензоксатіепінів, 5Н-4,1-бензоксатіепінів та методи їх функціоналізації на основі реакцій окиснення, відновлення, Вільсмайєра, з ДМФАДМА, бромом, з нуклеофілами та електрофілами, реакції Штрекера, Корі - Чайковського, Хорнера - Водсворта - Еммонса; 3-гетерилзаміщених піролідін-2,5-діонів, біс-адуктів Міхаеля в реакціях 2-амінопіридинів та 2-амінотіазолу з малеїнімідами, 3-(9Н-флуорен-9-іл)піролідін-2,5-діону, похідних 3-флуоренсукцинімідів; методи синтезу нових синтетичних амінокислот, похідних 3-арил(гетарил)ізокумаринів, 6-(ізокумарин-3-іл)-4-алкілumbеліферону, ряду аналогів гравеолону, піранонеофлавонів, 2Н-хромен-2-ону та запропоновано їх використання в якості флуоресцентних зондів; гетероаналогів 2-іміно-3-гетарилкумаринів, 3-гетарилхромонів, кума

**Соціально-економічна спрямованість НТП:**

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** 2014

**Закінчення етапу:**

**Споживачі продукції:** хімія, навчальний процес

**Перспективні ринки:** Україна

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**

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

**Наявність бізнес-плану:**

**Техніко-економічне обґрунтування:**

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**

**Очікуваний термін окупності (років):**

**Додаткова інформація:**

## IX. Бібліографічний опис

1) O. M. Zamotaiev, V. Y. Postupalenko, V. V. Shvadchak, V. G. Pivovarenko, A. S. Klymchenko, Y. M?ly. Monitoring penetratin interactions with lipid membranes and cell internalization using a new hydration-sensitive fluorescent probe. // Org. Biomol. Chem. - 2014, 12 (36) - p. 7036 - 7044. 2) Levkov, I.V., Cassel, S., Voitenko, Z.V., Saffon, N., Lattes, A., Rico-Lattes, I. Synthesis, autoorganization and reactivity of amphiphilic derivatives of 1-aminoisindole in water and formamide. // J. Surfactants and Detergents - 2014, V.17, №1 - p.101-109. 3) Matviiuk, T., Mori, G., Lherbet, C., Rodriguez, F., Pasca, M.R., Gorichko, M., Guidetti, B., Voitenko, Z., Baltas, M. Synthesis of 3-heteryl substituted pyrrolidine-2,5-diones via catalytic Michael reaction and evaluation of their inhibitory activity against InhA and Mycobacterium tuberculosis. // Eur. J. Med. Chem. - 2014, v.71 - p.46-52. 4) T. M. Tarasiuk, T. A. Volovnenko, Y. M. Volovenko, V. V. Medviediev, and O. V. Shishkin Dimethylaminomethylene derivatives of S,S-dioxides of 1,4-benzothiazepin-3(2H)-one and 4,1-benzothiazepin-2(3H)-one: comparison of interaction with nucleophiles. // Monatshefte f?r Chemie. - 2014, № 145. - p. 1987-1997.

## **Х. Заключні відомості**

**Керівник юридичної особи**

Вижва Сергій Андрійович

### **Перелік осіб-виконавців**

Єгорова Т.В.

Бойко О.М.

Бійцева А.В.

Горбуленко Н.В.

Кисіль А.І.

Кіндер Т.Д.

Левков І. В.

Любчук Тетяна Володимирівна

Манойленко О.В.

Матвіюк Т.В.

Москвіна В.С.

Пласконь А.С.

Потіха Л.М.

Тарасюк Т.М.

Туров В.О.

Хиля В.П.

Цапко М.Д.

Шилін С.В.

Шишкіна О.О.

Шокол Т.В.

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Телефон**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**

