Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U002631

Державний реєстраційний номер: 0122U000855

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-02-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розрахунок параметрів молекулярної структури вихідних та кінцевих сполук. Проведення скринінгу впливу умов конденсації на ізомерний склад продуктів синтезу: похідних індено- та індолохіноксалінону. Визначення за допомогою метода ВЕРХ оптимальних умов для одержання цільових похідних індено- та індолохіноксалінонів.

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1852.050

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Регіоселективність циклоконденсації альфа-дикарбонільних сполук із віцинальними діамінами з утворенням похідних хіноксаліну – потенційних лікарських засобів

Назва роботи англійською:

Regioselectivity of cyclocondensation of alpha-dicarbonyl compounds with vicinal diamines with the formation of quinoxaline derivatives - potential drugs

Реферат українською:

Мета дослідження: Вивчення умов спрямованого отримання та розділення модельних ізомерних похідних індено- та індолохіноксалінону, як потенційних потенційних лігандів ДНК, протиінфекційних та протизапальних агентів. Описаними в літературі методами (за потреби - із модифікаціями методик) були отримані низки експериментальних зразків, які презентують склад реакційних сумішей у реакціях конденсації нінгідрину або ізатину із асиметричними 1,2-діамінобензенами. Методом ВЕРХ із мас-спектрометричною або УФ-детекцією досліджено утворення ізомерів при цих конденсаціях. Встановлено, що для випадків конденсації із нінгідрином та ізатином вплив окремих замісників на відносний вихід ізомерів різниться. Методом препаративної колоночної хроматографії на силікагелі були здійснені спроби розділення регіо-ізомерних індолохіноксалінів, але через низьку розчинність та малу хроматографічну рухливість – виходи процесу – незначні. На прикладі 6(9)-(морфолінометил)індолохіноксаліну встановлено, що після функціоналізації замісника разом із розчинністю збільшується і різниця у хроматографічній рухливості ізомерів, що дало змогу виділити ізомерно-чистий продукт. Методами QSAR не виявлено кореляції між енергіями утворення окремих ізомерів або електронними параметрами замісників та їхнім виходом.

Реферат англійською:

The purpose of the research: Studying the conditions for the directed preparation and separation of model isomeric derivatives of indeno- and indoloquinoxalinone as potential potential DNA ligands, anti-infective and anti-inflammatory agents. Using the methods described in the literature (if necessary, with modifications of the methods), a number of experimental samples were obtained that present the composition of the reaction mixtures in the condensation reactions of ninhydrin or isatin with asymmetric 1,2-diaminobenzenes. The formation of isomers during these condensations was investigated using the HPLC method with mass spectrometric or UV detection. It was established that for cases of condensation with ninhydrin and isatin, the influence of individual substituents on the relative yield of isomers differs. Attempts were made to separate regio-isomeric indoloquinoxalines by the method of preparative column chromatography on silica gel, but due to low solubility and low chromatographic mobility, the yields of the process were negligible. Using the example of 6(9)-(morpholinomethyl)indoloquinoxaline, it was found that after the functionalization of the substituent, the difference in the chromatographic mobility of the isomers increases along with the solubility, which made it possible to isolate the isomerically pure product. QSAR methods revealed no correlation between the formation energies of individual isomers or electronic parameters of substituents and their yield.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.863.1+547 .7 56+547 .836+547.68+615.281 -8+615.276

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Кузьмін Віктор Євгенович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання:професор, член-кор.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Науковий звіт про результати розділення регіо-ізомерних сумішей на силікагелі, режимі прямо-фазної хроматографії щодо похідних індоло- та інденохінокалінів. Квантово-хімічний аналіз для теоретичної оцінки відносної стабільності ізомерів – продуктів взаємодії похідних інденохіноксалінонів з несиметричними фенілендіамінами. (6)9-Заміщені індено[1,2-b]хіноксалін-11-они. 7(8)-Заміщені індено[1,2-b]хіноксалін-11-они. 1(4)-Заміщені 6H-індоло[2,3-b]хіноксаліни. 2(3)-Заміщені 6H-індоло[2,3-b]хіноксаліни.

Назва НТП англійською: Scientific report on the results of the separation of regio-isomeric mixtures on silica gel, direct-phase chromatography mode for indolo- and indenoquinocaline derivatives. Quantum-chemical analysis for theoretical assessment of relative stability of isomers - products of interaction of indenoquinoxalinone derivatives with unsymmetrical phenylenediamines. (6)9-Substituted indeno[1,2-b]quinoxalin-11-ones. 7(8)-Substituted indeno[1,2-b]quinoxalin-11-ones. 1(4)-Substituted 6H-indolo[2,3-b]quinoxalines. 2(3)-Substituted 6H-indolo[2,3-b]quinoxalines.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Фармацевтичні підприємства, освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У звіті представлено на прикладі похідних індоло- та інденохінокалінів розглянуті перспективи розділення регіо-ізомерних сумішей на силікагелі, режимі прямо-фазної хроматографії. Отримані результати повязані із низькою розчинністю обраних сполук у неполярних розчинниках. Також наведені приклади хроматографічних систем для аналізу таких сумішей у режимі інструментальної обернено-фазової хроматографії. На основі хроматографічних експериментів методами компьютерної хімії зроблені припущення щодо складу ізомерних сумішей..

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Фармацевтичні підприємства, вищі навчальні заклади.

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Корнилов О.Ю., Крисько А.А., Крисько О.Л., Самбурський С.Е. Вісн. Одеського нац. ун-ту. Сер. Хімія. – 2022. – Т. 27, Вип. 2(82). – С. 76-82

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Кузьмін Віктор Євгенович
д. х. н.

Перелік осіб-виконавців

Дума Ганна Іванівна

Карпенко Олександр Сергійович
(к. х. н.)

Крисько Андрій Арнольдович
(к. х. н.)

Кузьмін Віктор Євгенович
(д. х. н.)

Огніченко Людмила Миколаївна
(к. х. н.)

Шибінська Марина Олегівна
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Іллюшко Н. О.

Телефон +38 (067) 724-39-55

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

