Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U033586

Державний реєстраційний номер: 0123U100681

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-12-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дерацемізація органічних сполук методом динамічного кінетичного розділення в присутності органокаталізаторів. Розробка методів встановлення абсолютної конфігурації синтезованих речовин та дослідження їх біоактивності.

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): Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442960409, 380445732552

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1802.862

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка методів синтезу та вивчення стереохімічної будови і властивостей потенційно біоактивних сполук

Назва роботи англійською:

Development of synthesis methods and study of stereochemical structure and properties of potentially bioactive compounds

Реферат українською:

Було розроблено стереоселективні методів одержання оптично активних сполук із потенційною біологічною активністю, як можливих вихідних для отримання фармпрепаратів. Досліджено методи отримання обох енантіомерів оптично активних гетероциклічних спиртів та амінів з використанням біоензиматичних каталізаторів. Показано, що хіміоферментні методи дерацемізації є чудовими, простими, екологічно чистими процедурами, спрямованими на отримання хіральноих сполук у вигляді однієї енантіомерно чистої формі. Ряд рацемічних 3-арилбутанових та 3-арил-2-метилпропанових кислот було успішно розділено на енантіомери за допомогою каталізованого ліпазою гідролізу. Оптична чистота та абсолютна конфігурації енантіомерів було встановлено методом хіральної ВЕРХ, молекулярне моделювання процесу ферментативного розділення та моделювання молекулярної динаміки. Було показано, що використання цих методів дозволяє передбачити абсолютну конфігурацію сполук, що утворюються в результаті реакції ферментативного розділення та краще дослідити механізм взаємодії фермент-субстрат.

Реферат англійською:

Stereoselective methods for obtaining optically active compounds with potential biological activity, as possible precursors for pharmaceuticals, have been developed. Methods for obtaining both enantiomers of optically active heterocyclic alcohols and amines using bioenzymatic catalysts were investigated. It was demonstrated that chemoenzymatic deracemization methods are excellent, simple, and environmentally friendly procedures aimed at obtaining chiral compounds in a single enantiomerically pure form. A series of racemic 3-arylbutanoic and 3-aryl-2-methylpropanoic acids were successfully resolved into enantiomers via lipase-catalyzed hydrolysis. The optical purity and absolute configuration of the enantiomers were determined using chiral HPLC, molecular modeling of the enzymatic separation process, and molecular dynamics simulations. It was shown that the use of these methods enables the prediction of the absolute configuration of the compounds formed as a result of the enzymatic separation reaction and provides a better understanding of the enzyme-substrate interaction mechanism.

Індекс УДК: 547.1'1, 547.41; 577.155.04

Коди тематичних рубрик: 31.21.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Колодяжна Анастасія Олегівна

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: ст.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Розробка методів стереоселективного синтезу та дослідження будови і фізико-хімічних властивостей сполук із потенційною біологічною активністю. Розробка методів встановлення абсолютної конфігурації синтезованих речовин та дослідження їх біоактивності.

Назва НТП англійською: Development of methods for stereoselective synthesis and study of the structure and physicochemical properties of compounds with potential biological activity. Development of methods for determining the absolute configuration of synthesized substances and investigation of their bioactivity.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: хімічна промисловість, фармпрепарати

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Було виконано серію успішних експериментів з ензиматичної дерацемізації фторованих арилкарбонових кислот. Були отримані рацемічні естери арилкарбонових кислот та проведена їх ензиматична дерацемізація. Такох успішно реалізували ензиматичну дерацемізацію 4,4,4-трифтор-3-фенілбутаноату. Будо проведено докінг та моделювання молекулярної динаміки, стереохімічні дослідження арилкарбонових кислот, визначені абсолютні конфігурації за допомогою ферментативної дерецемізації, визначені оптична чистота та абсолютна конфігурація енантіомерів за допомогою хіральної ВЕРХ. Такод були виконані молекулярне моделювання процесу ферментативного розділення та моделювання молекулярної динаміки.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Університети, інститути, а також комерційні фірми, що займаються дослідженнями і розробкою біоактивних препаратів

Перспективні ринки: Україна, країни ЄС, інші країни заходу

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

1. Enzymatic Deracemization of Fluorinated Arylcarboxylic Acids: Chiral Enzymatic Analysis and Absolute Stereochemistry Using Chiral HPLC. Kolodiazhnyi, Oleg I.; Kolodiazhna, Anastasiia O.; Faiziiev, Oleh; Gurova, Yuliia, [Symmetry, 2024, vol. 16, # 9, art. no. 1150]. https://doi.org/10.3390/sym16091150.

2. O.O. Kolodiazhna, D.V. Prysiazhnuk, A.O. Kolodiazhna, O.I. Kolodiazhnyi. Enzymatic resolution of heterocyclic intermediates for biologically active compound preparation. Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements, 2024. https://doi.org/10.1080/10426507.2024.2367033.

3. Kolodiazhnyi, Oleg I.; Kolodiazhna, Anastasy O. Stereoselective Syntheses of Organophosphorus Compounds. Symmetry, 2024, vol. 16, # 3, art. no. 342. https://doi.org/10.3390/sym16030342

4. Файзієв О. О., Колодяжна А. О., Колодяжний О. І. Енантіомерно чисті фторвмісні 3-гетероарилалканові кислоти. XVI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2024" (ХКЧ'24). Тези доповідей, С. 103.

5. Файзієв О.О., Колодяжна А.О., Колодяжний О.І. Дерацемізація фторованих арилкарбонових кислот за допомогою біокаталізатора Burkholderia cepacia ліпази у звичайних умовах і з мікрохвильовим опроміненням. XXXIX Наукова конференція з біоорганічної хімії та нафтохімії. Київ, 30 травня 2024 р. Тези доповідей.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Броварець Володимир Сергійович
д.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Гришкун Євген Володимирович
(к.х.н., 02.00.08)

Колодяжна Ольга Олегівна
(к.х.н., 02.00.10)

Колодяжний Олег Іванович
(д. х. н., 02.00.08, 02.00.10)

Присяжнюк Дмитро Володимирович
(к. т. н., 05.05.11)

Шейко Сергій Юрійович
(к.х.н., 02.00.10)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Бондаренко О.М.

Телефон

+38 (044) 573-27-01

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

