Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U031653

Державний реєстраційний номер: 0122U001962

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-05-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дизайн та розробка методів синтезу нітро-геновмісних природних сполук, їх функціоналізованих похідних та ізостерних аналогів.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного 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: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442393333, 380442393230

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 Перемоги, 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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 959.100

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Природні біомолекули та їх аналоги – основа створення молекулярних ансамблів для вирішенні проблем хімії, медицини та агрохімії

Назва роботи англійською:

Natural biomolecules and their analogues are the basis for creating molecular ensembles to solve problems of chemistry, medicine and agrochemistry

Реферат українською:

Проведено аналіз літературних даних щодо синтезу та властивостей оксигеновмісних та нітрогеновмісних гетероциклів, зокрема функціоналізованих хромонів, азахромонів, ізофлавонів, [1,2,4]триазоло[1,5-a]піридин-8-карбонітрилів, 5-аміно- та 5-гідразин-1,3-оксазолів. Розроблено методики синтезу нових нітрогеновмісних сполук, зокрема піразолів, оксазолів, ізоксазолів, піримідинів, ізохінолінів, бензодіазепінів та їх функціоналізованих похідних, в т.ч. спіроциклічних та ізостерних аналогів, флуоро-, фосфоровмісних та амінокислотних похідних. Досліджено флавоноїдний склад надземної частини E. annuus флори України, зібраної під час цвітіння на Сумщині; розроблено методологію синтезу природного халкону – Лікохалкону С, а також запропоновано синтез структурно споріднених ретрохалконів – Лікоагрохалконів B, C і D. Також розроблено ефективний синтетичний підхід до незаміщених 5- та 7-азахромонів, що може приводити до покращення фармакологічного профілю сполуки як потенційного кандидата в лікарські засоби, зокрема, зменшувати токсичність, покращувати метаболізм та збільшувати розчинність та афінність. Вперше розроблені синтетичні підходи до створення заміщених трифлуорометилциклопропанів, біцикло[2.1.0]пентанів, біцикло[2.2.2]октилгліцину, піразолів та піразолінів із фосфіноксидною групою, 2,2-дизаміщених та 2,2,3-тризаміщених 1,4-діоксанових будівельних блоків, α-гідроксициклопентан-/циклогексан-, α-цис-флуороциклопентан-/циклогексан- карбонових кислот та їх метилових естерів, а також досліджено підходи до синтезу, фізико-хімічні характеристики та структурні особливості 2-(трифлуоро-ацетил)оксазолів, 2-(дифлуорометил)-1-R-імідазолів, 3-(трифлуорометил)циклобут-1-ен-карбоксилату. Всі розроблені схеми синтезу є новими та економічно ефективними синтетичними стратегіями, що легко масштабуються та дозволяють отримувати структурно-різноманітні похідні у багатограмовій кількості, тим самим суттєво збагачуючи перелік потенційно біологічно активних сполук.

Реферат англійською:

The analysis of literature data regarding the synthesis and properties of Oxygen- and Nitrogen-containing heterocycles, particularly functionalized chromones, azachromones, isoflavones, [1,2,4]triazolo[1,5-a]pyridine-8-carbonitriles, 5-amino- and 5-hydrazine-1,3-oxazoles, has been conducted. Methodologies for synthesizing novel Nitrogen-containing compounds, including pyrazoles, oxazoles, isoxazoles, pyrimidines, isoquinolines, benzodiazepines, and their functionalized derivatives, including spirocyclic and isosteric analogs, fluoro-, phosphorus-containing, and amino acid derivatives, have been developed. The flavonoid composition of the aerial parts of E. annuus flora in Ukraine, collected during flowering in Sumy region, has been investigated. The synthesis methodology of the natural chalcone – Licochalcone C has been developed, and the synthesis of structurally related retrochalcones – Licoagrochalcones B, C, and D has been proposed. An efficient synthetic approach to unsubstituted 5- and 7-azachromones has been developed, potentially improving the pharmacological profile of the compound as a prospective candidate for medicinal use. This improvement includes the reduction of toxicity, enhancement of metabolism, and increased solubility and affinity. Pioneering synthetic methods have been established for substituted trifluoromethylcyclopropanes, bicyclo[2.1.0]pentanes, bicyclo[2.2.2]octylglycine, pyrazoles, and pyrazolines with a phosphinoxide group, 2,2-disubstituted and 2,2,3-trisubstituted 1,4-dioxane building blocks, α-hydroxycyclopentane-/cyclohexane-, α-cis-fluorocyclopentane-/cyclohexane-carboxylic acids

and their methyl esters, as well as approaches to the synthesis, physico-chemical characteristics, and structural features of 2-(trifluoroacetyl)oxazoles, 2-(difluoromethyl)-1-R-imidazoles, and 3-(trifluoromethyl)cyclobut-1-ene-carboxylate have been explored.

Індекс УДК: 547.9;577.1, 547

Коди тематичних рубрик: 31.23, 31.21

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методики синтезу нових нітрогеновмісних сполук

Назва НТП англійською: Methods of synthesis of new nitrogen-containing compounds

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методики синтезу нових сполук

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено методики синтезу нових нітрогеновмісних сполук, зокрема піразолів, оксазолів, ізоксазолів, піримідинів, ізохінолінів, бензодіазепінів та їх функціоналізованих похідних, в т.ч. спіроциклічних та ізостерних аналогів, флуоро-, фосфоровмісних та амінокислотних похідних. Досліджено флавоноїдний склад надземної частини E. annuus флори України, зібраної під час цвітіння на Сумщині; розроблено методологію синтезу природного халкону – Лікохалкону С, а також запропоновано синтез структурно споріднених ретрохалконів – Лікоагрохалконів B, C і D. Також розроблено ефективний синтетичний підхід до незаміщених 5- та 7-азахромонів, що може приводити до покращення фармакологічного профілю сполуки як потенційного кандидата в лікарські засоби, зокрема, зменшувати токсичність, покращувати метаболізм та збільшувати розчинність та афінність. Вперше розроблені синтетичні підходи до створення заміщених трифлуорометилциклопропанів, біцикло[2.1.0]пентанів, біцикло[2.2.2]октилгліцину, піразолів та піразолінів із фосфіноксидною групою, 2,2-дизаміщених та 2,2,3-тризаміщених 1,4-діоксанових будівельних блоків, α-гідроксициклопентан-/циклогексан-, α-цис-флуороциклопентан-/циклогексан- карбонових кислот та їх метилових естерів, а також досліджено підходи до синтезу, фізико-хімічні характеристики та структурні особливості 2-(трифлуоро-ацетил)оксазолів, 2-(дифлуорометил)-1-R-імідазолів, 3-(трифлуорометил)циклобут-1-ен-карбоксилату. Всі розроблені схеми синтезу є новими та економічно ефективними синтетичними стратегіями, що легко масштабуються та дозволяють отримувати структурно-різноманітні похідні у багатограмовій кількості, тим самим суттєво збагачуючи перелік потенційно біологічно активних сполук. Серед отриманих похідних знайдені сполуки з протиракovою активністю по усім 60 лініям ракових клітин. Для окремих сполук досліджені можливості їх застосування в комплексній терапії хвороби Паркінсона.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

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

Статті у журналах, що індексуються наукометричними базами даних - 16; статті у фахових виданнях України - 4; публікації у матеріалах конференцій, тезах доповідей та виданнях - 14; монографії та розділи монографій, опубліковані в українських видавництвах - 1; захищено дисертацій доктора філософії - 1; подано заявок на отримання охоронного документу на ОПІВ України та /або інших країн - 1

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Толстанова Ганна Миколаївна
д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Благун Олександр Петрович
(к. х. н.)

Весельський Станіслав Павлович
(д.б.н., 03.00.13)

Глібов Євген Костянтинович

Григоренко Олександр Олегович
(д. х. н., 02.00.03)

Жерш Сергій Анатолійович
(к. х. н.)

Москвіна Вікторія Сергіївна
(к. х. н., 02.00.03)

Шабликіна Ольга Валентинівна
(к. х. н., 02.00.03)

Шокол Тетяна Віталіївна
(к. х. н.)

Штанова Лідія Яківна
(к. б. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Катасонова В.В.

Телефон +38 (044) 239-31-88

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності