Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U102015

Державний реєстраційний номер: 0119U102244

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-12-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дизайн, синтез та спрямовані хімічні трансформації гетероциклічних сполук ряду азолів і азинів.

Початок етапу: 05.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітного документа: Остаточний 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. Мурманська, 1, м. Київ, Київська обл., 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445599800, 380445585388

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, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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.): 175.1

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дизайн, синтез та спрямовані хімічні трансформації гетероциклічних сполук ряду азолів і азинів

Назва роботи англійською:

Design, synthesis, and directed chemical transformations of heterocyclic compounds of a series of azoles and azines.

Реферат українською:

Узагальнено та систематизовано літературні дані по синтезу та хімічним властивостям □-алкоксивініл(трифторометил)кетонів. Зазначено, що реакції трифторацилювання активованих алкенів є ефективним методом синтезу □-алкоксивініл(трифторометил)кетонів. Також разглянуто використання □-алкоксивініл(трифторометил)кетонів для синтезу різноманітних сполук. Зазначено, що наявність двох реакційних центрів в □-алкоксивініл(трифторометил)кетонах дозволить ефективно використовувати їх в синтезі нітрогеновмісних гетероциклічних сполук, що містять трифторометильну групу. З метою одержання нових трифторометилвмісних ненасичених кетонів циклічної будови вивчені реакції трифторацетилювання 4-метилен-1,3-діоксоланів. Вперше синтезовано нові циклічні трифторо-, дифторо- та трихлорометиленони з додатковою замаскованою □-гідроксиметильною групою. Досліджено реакційну здатність синтезованих сполук у реакціях з нуклеофілами. Розроблено методику отримання енамінонів з додатковою □-гідроксиметильною групою з високими виходами на прикладі амінів різного ступеня заміщення. Отримано різноманітні енамінони, проведено дослідження рівноваги та відносного вмісту Z/E-ізомерів в залежності від полярності розчинника. Показано, що взаємодія трифторо- та дифторометиленонів з гідразином в ацетонітрилі являє собою ефективний підхід до 3-трифторметил- та 3-дифторометилпіразолів з додатковою гідроксиметильною групою з виходом 75-77%. Досліджено реакцію нових циклічних енонів з водою та отримано продукт гідролізу, що утворюється за рахунок внутрішньомолекулярної циклізації. Розроблено умови окислення трифторо- та дифторометилвмісних піразолів з додатковою гідроксиметильною групою до відповідних альдегідів і карбонових кислот. Досліджено процеси хімічних перетворень трифторо- та дифторометилвмісних піразолів з додатковою гідроксиметильною групою у відповідні фторметильні похідні при взаємодії з чотирифтористою сіркою.

Реферат англійською:

The literature data on the synthesis and chemical properties of □-alkoxyvinyl trifluoromethyl ketones were summarized. In order to obtain new trifluoromethyl-containing unsaturated cyclic ketones, trifluoroacetylation reactions of 4-methylene-1,3-dioxolanes were studied. New cyclic trichloro- and trifluoromethyleneones with an additional masked □-hydroxymethyl group were synthesized. The reactivity of the obtained compounds in reactions with nucleophiles was investigated. Procedure for the preparation of enaminones with an additional □-hydroxymethyl group in high yields has been developed. Various enaminones have been obtained; an equilibrium and relative content of Z/E isomers have been investigated depending on the polarity of the solvent. The interaction of trifluoro- and difluoromethyleneones with hydrazine in acetonitrile was shown to be an effective approach to 3-trifluoromethyl- and 3-difluoromethylpyrazole with an additional hydroxymethyl group in 75-77% yield. The reaction of new cyclic trifluoromethylenones with water has been investigated and the products of hydrolysis formed by intramolecular cyclization were obtained. The oxidation of trifluoro- and difluoromethyl-containing pyrazoles with an additional hydroxymethyl group to the corresponding aldehydes and carboxylic acids was developed. The transformations of trifluoro- and difluoromethyl-containing pyrazoles with an additional hydroxymethyl group into the corresponding fluoromethyl derivatives in reaction with sulfur tetrafluoride are studied.

Індекс УДК: 547.1'1

Коди тематичних рубрик:31.21.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Сорочинський Олександр Євгенович

Науковий ступінь: к.х.н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Наукові публікації та методики синтезів нових перфторалкілвмісних ненасичених кетонів циклічної будови та гетероциклів з перфторалкільними замісниками

Назва НТП англійською: Scientific publications and procedures for synthesis of new perfluoroalkyl-containing unsaturated cyclic ketones and and heterocycles with perfluoroalkyl substituents

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Медична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено методики синтезів нових трифторометилвмісних ненасичених кетонів циклічної будови та досліджено реакційну здатність синтезованих сполук у реакціях з нуклеофілами. Розроблено методики синтезів гетероциклів з перфторалкільними замісниками

Соціально-економічна спрямованість НТП: 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: 05.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Споживачі продукції: Науково-дослідні установи

Перспективні ринки: Україна, зарубіжні науково-дослідні установи

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

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

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Gerus I.I., Balabon O.A., Pazenok S.V., Lui N., Kondratov I.S., Tarasenko K.V., Shaitanova E.N., Ivasyshyn V.E., Kukhar V.P. Synthesis and properties of new polyfunctional cyclic □-alkoxy-□,□-unsaturated ketones on the base of 4-methylene-1,3-dioxalanes // Eur. J. Org. Chem. – 2018 – P. 3853–3861.

2. Khlebnicova T.S., Piven Y.A., Isakova V.G., Baranovsky A.V., Lakhvich F.A., Sorochinsky A.E., Gerus I.I. Regioselective Synthesis of Polyfluoroalkyl Substituted 6,7-Dihydrobenzisoxazolones // Journal of Heterocyclic Chemistry – 2018 – Vol. 55 – P. 1791-1797.

3. Gerus I.I., Zhuk Y.I., Tarasenko K.V., Shaitanova E.N., Sorochinskii A. E. Synthesis and evaluation of new tri- and difluoromethyl containing 2,6,9-trioxabicyclo[3.3.1]nonanes // J. Fluorine Chem. – 2019 – Vol. 222–223 – P. 100–105.

4. Кліпков А.А., Герус І.І. Синтез трифлуорометилвмісних піролів // Катализ и нефтехимия. – 2019 - № 28 – Р. (друкується)

5. Klipkov A.A., Sorochinsky A.E., Tarasenko K.V., Rusanova J.A., Gerus I.I. Synthesis of trifluoromethyl and trifluoroacetyl substituted dihydropyrrolizines and tetrahydroindolizines // Tetrahedron Lett. 2019, in press, reg.number – TETL-S-19-02151.

6. Gerus I.I., Klipkov A.A., Tarasenko K.V., Shaitanova E.N. Synthesis of trifluoromethylpyrroles – verification of previous data // 19th European Symposium on Fluorine Chemistry, August 25-31 2019, Book of Abstracts, Warsaw, Poland, P. 180 (O-C11).

7. Khlebnicova T.S., Gerus I.I., Piven Yu.A., Smaliak V.A., Lakhvich F.A., Sorochinsky A.E. Synthesis of 4-amino-substituted 3-fluoroalkyl(aryl)-1,2-benzisoxazoles // 19th European Symposium on Fluorine Chemistry, August 25-31 2019, Book of Abstracts, Warsaw, Poland, P. 275 (O-P03).

8. Tarasenko K.V., Gerus I.I., Klipkov A.A., Shaitanova E.N. Synthesis of trifluoromethylpyrroles verification of previous data // Asian Federation of Medicinal Chemistry (AFMC) 12th International Symposium, September 08-11, 2019, Book of Abstracts, Istanbul, Turkey, P. 168 (PP52).

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Вовк Андрій Іванович, д. х. н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Бугера Максим Ярославович

Герус Ігор Іванович
(к. х. н., 02.00.08)

Жук Юрій Іванович

Шайтанова Олена Миколаївна
(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

