

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U107049

Державний реєстраційний номер: 0121U110781

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез та структурна функціоналізація азоло-(азино)анельованих трифторометилпіримідинів та тіазоло(триазоло-, піразоло)азинових сполук.

Початок етапу: 04.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул. Мурманська, буд. 5, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445527150, 380445510613, 380445732643

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, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 650.000
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Анелювані азинові та азепінові скафолди для потреб медичної хімії

Назва роботи англійською:

Annulated azine and azepine scaffolds for medical chemistry

Реферат українською:

За допомогою органофотокаталітичної реакції Гізе N-Вос амінометилтрифлуороборатів з 4-СF₃-піримідин-2(1H)-онами отримано N-Вос амінометилфункціоналізовані 6-трифторометилпіримідин-2(1H)-они. Показано, що циклоконденсація (1,3-тіазолідин-2-іліден)кетонів з ароіл- та тіоїл ізотіоціанатами є ефективним підходом до побудови нового (2-метил-5-арил(гетерил)-7-тіоксо-2,3-дигідро-7H-[1,3]тіазоло[3,2-с]піримідин-8-іл)кетонів. Знайдено нову, ініційовану PIFA окислювальну циклізацію 2-(бут-3-ен-1-іл)хіназолін-4(3H)-онів в 1-(гідроксиметил)-2,3-дигідропіроло[1,2-а]хіназолін-5(1H)-они. Встановлено, що внутрішньомолекулярна галогеноциклізація N-аліл-4,5-дигідро-3H-1-бензазепін-2-амінів під дією N-йодосукциніміду та N-бромосукциніміду приводять до утворення із високими виходами галогенометилфункціоналізованих тетрагідроімідазобензазепінів – перспективних скафолдів для структурної модифікації біофоридами у групуваннями. З'ясовано вплив природи електрофільного реагенту та структурних параметрів нуклеофільного субстрату на регіоспрямованість процесу циклізації N-1(2)нафтиламідів трилцтових кислот під дією арилсульфенілхлоридів та запропоновано препаративно простий метод синтезу сульфанілвмісних нафто[1,2-б]-, нафто[2,1-б]бензазепін-2-онів. Розроблено зручний підхід до отримання нових біоперспективних похідних 8-(алкіліміно)-4,8-дигідро-1H-[1,2,3]тріазоло[4,5-е][1,4]тіазепін-5(6H)-онів та 5-оксо-4,5-дигідро-1H-[1,2,3]тріазоло[4,5-б]піридин-6-карбонових кислот.

Реферат англійською:

N-Boc aminomethylfunctionalized 6-trifluoromethylpyrimidin-2(1H)-ones were obtained by organophotoredox catalyzed Giese-type reaction of N-Boc aminomethyltrifluoroborates with 4-CF₃-pyrimidin-2(1H)-ones. Demonstrated that the cyclocondensation of (1,3-thiazolidin-2-ylidene)ketones with aroyl and thienoyl isothiocyanates is an effective approach to the construction of the new (2-methyl-5-aryl(heteryl)-7-thioxo-2,3--dihydro-7H-[1,3]thiazolo[3,2-c]pyrimidin-8-yl)ketones A novel PIFA-initiated oxidative cyclization of 2-(but-3-en-1-yl)quinazolin-4(3H)-ones into 1-(hydroxymethyl)-2,3-dihydropyrrolo[1,2-a]quinazolin-5(1H)-ones. Showed that the halocyclization of N-allylbenzazepinamines is an effective method for the synthesis of new halomethyl-substituted imidazobenzazepines, promising molecular platforms for subsequent structural modification with biophoric groups. Elucidated the effect caused by the structure and electronic nature of the nucleophilic substrates and the electrophilic reagents on the regioselectivity of the cyclization which N-(1(2)-naphthyl)styrylacetamides undergo with arenesulfenyl chlorides. On this basis, a facile preparative route to arylthio substituted naphtho[1,2-b]- and naphtho[2,1-b]azepinones has been developed. The structure of all the synthesized compounds is definitely proved by spectral methods and X-ray diffraction analysis. A convenient approach to obtaining new biopromising derivatives has been developed 8-(alkylimino)-4,8-dihydro-1H-[1,2,3]triazolo[4,5-e][1,4]thiazepin-5(6H)-ones and 5-oxo-4,5-dihydro-1H-[1,2,3]triazolo[4,5-b]pyridine-6-carboxylic acids.

Індекс УДК: 547.7/.8

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Ткачук Віктор Миколайович

Науковий ступінь: к. х. н.

Вчене звання:н.с

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Розроблення методології синтезу нових конденсованих піримідинових та (тіо)азепінових систем для синтезу біологічно активних речовин

Назва НТП англійською: Development of a methodology for the synthesis of new condensed pyrimidine and (thio)azepine systems for the synthesis of biologically active substances

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезовано 4-(N-Вос-аміно)-1H-1,2,3-триазолкарботіоаміди, 8-(алкіліміно)-4,8-дигідро-1H-[1,2,3]триазоло[4,5-e][1,4]тіазепін-5(6H)-они, 1,3,4,5-тетрагідро-2H-1-бензазепін-2-іліден)проп-2-ен-1-аміни, 1-(галогенометил)-2,4,5,6-тетрагідро-1H-імідазо[1,2-a][1]бензазепіни, 1-(гідроксиметил)-2,3-дигідропіроло[1,2-a]хіназолін-5(1H)-они. Отримано похідні 5H-[1,3]тіазоло[3,2-с]піримідинів та 7-тіоксо[1,3]тіазоло[3,2-с]піримідину, для яких була досліджена антимикробна та антиоксидантна активність. Продемонстровано можливість введення N-алкіл(бензил)-4-трифторометилпіримідин-2(1H)-онів, як акцепторів Міхаеля у фотокаталітичну взаємодію з N-Вос амінометилтрифлуороборатами в реакції Гізе.

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:

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Danyliuk, I.Yu., Vaskevych, A.I., Vaskevych, R.I., Rusanov, E.B., Vovk, M.V. Cyclosulfenylation of N-(1(2)-naphthyl)styrylacetamides as a synthetic route to 4(2)-arylthio naphtho[1,2-b]([2,1-b])azepin-2(4)-ones. *Journal of Sulfur Chemistry*. 2021, 42 (3), 264-280. DOI: 10.1080/17415993.2020.1855431.
2. Syrota N.A., Kemskiy S.V., Bol'but A.V., Chernobaev I.I., M.V. Vovk M.V. 4-(N-Boc-amino)-1H-1,2,3-triazolecarbothioamides in the synthesis of a new heterocyclic [1,2,3]triazolo[4,5-e][1,4]tiazepin system. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*. 2021, 57 (7/8), 841-847. DOI: 10.1007/s10593-021-02989-1.
3. Litvinchuk, M.B., Bentya, A.V., Rusanov, E.B., Vovk, M.V. Activated 2-methyldene-1,3-thiazolidin-4-ones in a promising approach to the synthesis of polyfunctional thiazolo[3,2-c]pyrimidines. *Monatshefte fur Chemie*. 2021, 152, 1261-1268. DOI: 10.1007/s00706-021-02840-5.
4. Vaskevych, A.I., Savinchuk, N.O., Vaskevych, R.I., Rusanov, E.B., Grygorenko, O.O., Vovk, M.V. The PIFA-initiated oxidative cyclization of 2-(3-butenyl)quinazolin-4(3H)ones – an efficient approach to 1-(hydroxymethyl)-2,3-dihydropyrrolo[1,2-a]quinazolin-5(1H)-ones. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*. 2021, 17, 2787-2794. DOI: <https://doi.org/10.3762/bjoc.17.189>.
5. Сирота Н., Кемський С, Вовк М. Зручний варіант синтезу 5-оксо-4,5-дигідро-1H-[1,2,3]-триазоло[4,5-b]піридин-6-карбонової кислоти. Вісник Львівського університету. Серія хімічна. 2021, 62, 191-196 DOI: 10.30970/vch.6201.191
6. Litvinchuk, M.B., Bentya, A.V., Stasevych, M.V., Zvarych, V.I., Komarovska-Porokhnyavets, O.Z., Stadnytska, N.E., Lubenets, V.I., Rusanov, E.B., Vovk, M.V. An efficient approach to the synthesis of 7-thioxosubstituted [1,3]thiazolo[3,2-c]pyrimidines and evaluation of their antimicrobial and antioxidant activities. *Phosphorus, Sulfur, Silicon, Relat. Elem.* (опубліковано онлайн). DOI: 10.1080/10426507.2021.1986504.
7. Danyliuk, I.Yu., Tolmachova, V.S., Rusanov, E.B., Vovk, M.V. A convenient approach to the synthesis of 1-galogenmetil functionalization 2,4,5,6-tetrahydro-1H-benzo[f]imidazo[1,2-a]azepine. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*. 2021, 57 (12), 1187-1194.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Михайло Володимирович
д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Данилюк Іванна Юріївна
(к.х.н., 02.00.03)

Кемський Сергій Володимирович
(к. х. н., 02.00.03)

Літвінчук Марія Богданівна
(к.х.н., 02.00.03)

Савінчук Наталія Олександрівна

Ткачук Віктор Миколайович
(к. х. н., 02.00.03)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Данилюк Іванна Юріївна

Телефон

+38 (068) 729-20-47

Реєстратор

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

