

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U001919

Державний реєстраційний номер: 0123U101168

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дизайн флуорофорних структур із застосуванням нових реакцій та комп'ютерного моделювання.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070758

Місцезнаходження: просп. Гагаріна, буд. 8, м. Дніпро, Дніпровський р-н., Дніпропетровська обл., 49005, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380567462706, 380567462668

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 Берестейський, 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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1000.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові принципи синтезу флуоресцентних матеріалів та біологічно-активних N-, S-вмісних гетероциклів.

Назва роботи англійською:

New principles of synthesis of fluorescent materials and biologically active N,S-containing heterocycles.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – NIR (Near InfraRed)-флуоресцентні барвники, фотоелементи для сонячних батарей та оптичні фільтри, а також N,S-п-амідоалкілювання та споріднені процеси для створення функціоналізованих гетероциклічних систем – потенційних фармсубстанцій. Мета роботи – визначення оптимальних умов синтезу низки ксантенових барвників та дослідження їх спектральних властивостей; розробка зручних способів одержання нових типів N,S-амідоалкілюючих та споріднених реагентів з гетерокумуленовими угрупованнями. Методи дослідження – хімічний синтез, тонкошарова хроматографія (ТШХ), рентгеноструктурний аналіз (РСА), інфрачервона спектроскопія (ІЧ-) та ядерний магнітний резонанс (ЯМР)-спектроскопія, ультрафіолетова спектроскопія (УФ), мас-спектрометрія та квантово-хімічні розрахунки. Було отримано комплекс даних щодо синтезу ксантенових барвників та досліджено їх спектральні властивості, такі як квантовий вихід, спектри поглинання та флуоресценції, коефіцієнти молярної екстинкції. Також за звітний період розроблено метод синтезу ксантенових барвників з прогнозованими фотофізичними властивостями і новий метод синтезу похідних 2H-1,3,5-оксадіазин-2,4(3H)-диіміну. Галузь використання результатів роботи: С 21.10 Виробництво основних фармацевтичних продуктів, С 20.12 Виробництво барвників і пігментів.

Реферат англійською:

The object of research is NIR (Near InfraRed) fluorescent dyes, photocells for solar cells and optical filters, as well as N,S-p-amidoalkylation and related processes for the creation of functionalized heterocyclic systems - potential pharmaceutical substances. The aim of the work is to determine the optimal conditions for the synthesis of a number of xanthine dyes and study their spectral properties; to develop convenient methods for the preparation of new types of N,S-amidoalkylating and related reagents with heterocoupled groups. The research methods used were chemical synthesis, thin-layer chromatography (TLC), X-ray diffraction (XRD), infrared spectroscopy (IR) and nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, ultraviolet spectroscopy (UV), mass spectrometry and quantum chemical calculations. A set of data on the synthesis of xanthine dyes was obtained and their spectral properties, such as quantum yield, absorption and fluorescence spectra, and molar extinction coefficients, were studied. Also during the reporting period, a method for the synthesis of xanthine dyes with predictable photophysical properties and a new method for the synthesis of 2H-1,3,5-oxadiazine-2,4(3H)-diimine derivatives were developed. Field of application of the results of work: C 21.10 Manufacture of basic pharmaceutical products, C 20.12 Manufacture of dyes and pigments.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.835.867+547.854.3+547.757+547.556.92+547.556.93+547-386

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Фарат Олег Костянтинович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Метод синтезу ксантенових барвників з прогнозованими фотофізичними властивостями

Назва НТП англійською: Method of synthesis of xanthene dyes with predicted photophysical properties

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 20.12 - Виробництво барвників і пігментів

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: За розробленим методом при охолодженні льодом готують реагент Вільсмайера-Хаака з 2.3 мл (0.03 моль) диметилформаміда та 0.92 мл (0.01) хлорокису фосфора. До отриманого реагенту додають 1.22 г (0.006 моль) 7-гідрокси-4Н-спіро[1,3-бензодіоксин-2,1-циклопентан]-4-он та гріють при 110°C протягом 5 год. Після охолодження до кімнатної температури додають 15 мл 15%-го водного розчину перхлорату натрію та фільтрують осад, що утворився. Вихід 70%, Тпл.=120–122°C (MeCN), жовтий порошок. Аналогічні методи синтезу ксантенових барвників наразі відсутні. Встановлено, що комбінація та варіація електронно-донорних/акцепторних замісників в 9-му та 4-му положеннях ксантенового каркасу дозволяє цілеспрямовано змінювати їх фотофізичні характеристики, а саме значно змінює максимум поглинання в червону область спектру до 713 нм і підвищує відносний квантовий вихід (відносно Родаміну Б) до 23% у порівнянні з комерційними барвниками. Також слід зазначити гарну розчинність барвника 2.14 у воді, а це означає що ця сполука є дуже перспективним біомаркером для біохімічних досліджень біологічних рідин та організмів. Одностадійний метод синтезу дозволить знизити собівартість продукції, оскільки вихідні речовини легкодоступні, та проведення методу не потребує дорогого обладнання. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Збільшення обсягів виробництва, Економія матеріалів, 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: підприємства хімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна, ЄС, США

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

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

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:0

Очікуваний термін окупності (років): 0

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Новий метод синтезу похідних 2Н-1,3,5-оксадіазин-2,4(3Н)-дііміну.

Назва НТП англійською: A new method of synthesis of 2H-1,3,5-oxadiazine-2,4(3H)-diimine derivatives.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: С 21.10 Виробництво основних фармацевтичних продуктів.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: До 10 ммоль відповідного N-(2,2,2-трихлор-1-гідроксіетил)карбоксаміду у 25 мл CCl₄ додали 12 ммоль SOCl₂. Кип'ятили зі зворотним холодильником 1.5-3 години, до повного закінчення виділення газоподібних продуктів. Реакційну масу охолоджували, після чого розчинник випарювали під вакуумом. Сухий залишок N-(1,2,2,2-тетрахлоретил)карбоксаміду обробляли 10-12 мл гексану. Отриману суспензію фільтрували. Суху масу хлорпродукту розчинили в 15 мл безводного ацетонітрилу і додали розчин 10 ммоль (2.06 г) ДЦК і 11 ммоль (1.11 г/1.5 мл) триетиламіну в 15 мл ацетонітрилу. Суміш перемішували 15 хвилин, а потім залишали на 24 години. Осад, що випав, фільтрували і очищали перекристалізацією з ацетонітрилу. До переваг методу можна віднести використання дешевого і менш токсичного, порівняно з піридином, триетиламіну. Використовуючи цей метод, вдалося вперше синтезувати похідні 2Н-1,3,5-оксадіазин-2,4(3Н)-дііміну, що містять хлорметильний, стиральний/styryl і п-толильний замісники. Застосування розробленого методу синтезу дозволить знизити собівартість виготовлення потенційних лікарських препаратів, оскільки вихідні речовини легкодоступні та метод не потребує дорогоцінного обладнання. Науково-технічна продукція на навколишнє середовище не впливає.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Збільшення обсягів виробництва, Економія матеріалів, 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: підприємства хімічної промисловості

Перспективні ринки: Україна, ЄС, США

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

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

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:0

Очікуваний термін окупності (років): 0

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

1. Zadorozhnii, P.V. Synthesis of (Z)-N,3-dicyclohexyl-6-substituted-4-(trichloromethyl)-3,4-dihydro-2H-1,3,5-oxadiazin-2-imines via [4+2] hetero Diels-Alder reaction: their spectral characteristics and molecular structure [Text] / P.V. Zadorozhnii, I.O. Pokotylo, V.V. Kiselev, A.V. Kharchenko // Chem. Data Coll. – 2023. – 48. – P. 101093. <https://doi.org/10.1016/j.cdc.2023.101093>.
2. Varenichenko, S.A. Synthesis and in silico admet profiling of novel 5-arylidene-2-(2,3,5,6,7,8-hexahydroacridin-4(1h)-ylidene)-1,3-thiazolidin-4-ones [Text] / S.A. Varenichenko, A.V. Kharchenko, O.K2. Farat // Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2023. – № 6. – P. 37-44. <https://udhtu.edu.ua/public/userfiles/file/VHHT/2023/6/Varenichenko.pdf>.
3. Pavlova, V.V. Modeling of new potential inhibitors of dihydrofolate reductase based on 1,3,4-thiadiazole amidoalkyl derivatives [Text] / V.V. Pavlova, P.P. Zadorozhniia, V.V. Kiselev [et al.] // Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2023. – №5. – P. 91-97. <https://udhtu.edu.ua/public/userfiles/file/VHHT/2023/5/Pavlova.pdf>.
4. Farat, O.K. In silico prediction of biological activity of bromo derivatives of hydroacridines [Text] / O. K. Farat, S. A. Varenichenko, V. I. Markov, K.V. Yanova // Український хімічний журнал. – 2023. – № 6. – 97-110. <https://doi.org/10.33609/0041-6045.86.2.2020.111-122>.
5. Pavlova, V. Synthesis of N-(2,2,2-trichloro-1-((5-(arylamino)-1,3,4-thiadiazol-2-yl)amino)ethyl)carboxamides [Text] / V. Pavlova, P. Zadorozhnii, I. Oleshkevich // II All-Ukrainian scientific and practical conference: conference materials of the young scholars and students (Dnipro, 11 May 2023). – Dnipro, 2023. – P. 47-48.
6. Lomynoha, E. Development of a new synthesis method of 4H-1,3,5-oxadiazine derivatives [Text] / E. Lomynoha, V. Kiselev, P. Zadorozhnii, I. Oleshkevich // II All-Ukrainian scientific and practical conference: conference materials of the young scholars and students (Dnipro, 11 May 2023). – Dnipro, 2023. – P. 44-45.
7. Lominoga, E.R. Synthesis, Spectral Characteristics, and Molecular Docking Studies of 2-(2,4-Dichlorophenoxy)-N-(2,2,2-Trichloro-1-(3-Arylthioureido)Ethyl)Acetamide [Text] / E.R. Lominoga, P.V. Zadorozhnii, V.V. Kobets [et al.] // 4th International Electronic Conference on Applied Sciences: proceedings (Basel (Switzerland), 27 Oct-10 Nov 2023). – Basel, 2023. – P. 1-4.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Зайчук Олександр Вікторович

д. т. н., 05.17.11

Перелік осіб-виконавців

Варениченко Світлана Анатоліївна

(к.х.н., 02.00.03)

Задорожній Павло Вікторович

(к.х.н., 02.00.03)

Ковтун Антон Володимирович

(д.філософ, 102)

Павлова Валерія Вячеславівна

Свояков Ростислав Петрович

Сметанін Микола Вікторович

(д.філософ, 102)

Фарат Олег Костянтинович

(д.х.н., 02.00.03)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Архипова В.В.

Телефон

+38 (099) 265-76-24

Реєстратор

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

