Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U106621

Державний реєстраційний номер: 0121U109327

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вивчення каталітичного гідрування біциклічних трифторометилпіролів. Вивчення біоактивності трифторметильних похідних біциклічних азагетероциклів та гетарилхалконів в модельних системах.

Початок етапу: 02.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

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.): 244.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез нових похідних гетарилхалконів і трифторометил-піролів та оцінка їх активності як інгібіторів терапевтично важливих ферментів

Назва роботи англійською:

Synthesis of new derivatives of getaryl chalcones and trifluoromethyl-pyrroles and evaluation of their activity as inhibitors of therapeutically important enzymes

Реферат українською:

Узагальнено та систематизовано літературні дані по синтезу трифторометилпіролів. Дією α-алкоксивініл(поліфтороалкіл)кетонів на пролін, піпеколінову кислоти та N-заміщені гліцини синтезовано N-(α-поліфтороацил)вінілопохідні відповідних амінокислот. Систематично досліджена циклізації N-(α-трифтороацил)вінілопохідних циклічних амінокислот в присутності ангідридів і хлорангидридів органічних кислот. Встановлено структури продуктів циклізації. Синтезовани біциклічні трифторметилпіроли. Запропонован механізм циклізації якій пояснює утворення біциклічних трифторметилпіролів та біциклічних піролів, що містять трифторметильну та трифторацетильну групи у пірольному кільці. Вивченно каталітичне гідрування біциклічних трифторометилпіролів та отримани трифторометильовани похідні піролізидину та індолізидину з визначеною стереохімією. Встановленно закономірності і оптимальни умови перебігу реакцій гетерогенного гідрування з використанням каталізаторів на основі платини, паладію і родію. Методом комп'ютерного моделювання встановлено, що серед трифторометилпіролідинів, трифторометилпіперидинів та трифторометилпіролів є потенційні інгібітори терапевтично важливих ферментів, таких як холінестерази, протеїнтирозинфосфатази, ксантиноксидаза, лейцинамінопептидаза та глутатіон-S-трансферази. In vitro вивчено структурні аналоги халконів та гетарилхалкони як інгібітори глутатіон-S-трансферази, PTP1B та ксантиноксидази.

Реферат англійською:

The literature data on the synthesis of trifluoromethylpyrroles was generalized and systematized. N-(α-Polyfluoroacyl)vinyl derivatives of the proline, pipecolic acid and N-substituted glycines were synthesized by treatment of corresponding amino acids with α-alkoxyvinyl(polyfluoroalkyl) ketones. The cyclization of N-(α-trifluoroacyl)vinyl derivatives of cyclic amino acids in the presence of anhydrides and chlorides of organic acids has been systematically studied. The structures of cyclization products were established. Bicyclic trifluoromethylpyrroles were synthesized. A cyclization mechanism which explains the formation of bicyclic trifluoromethylpyrroles and bicyclic pyrroles containing trifluoromethyl and trifluoroacetyl groups in the pyrrole ring was proposed. Catalytic hydrogenation of bicyclic trifluoromethylpyrroles was investigated and trifluoromethylated derivatives of pyrrolizidine and indolizidine with define stereochemistry were obtained. Optimal conditions for the heterogeneous hydrogenation reactions using platinum, palladium and rhodium catalysts have been established. Computer simulations have shown that among trifluoromethylpyrrolidines, trifluoromethylpiperidines, and trifluoromethylpyrroles there are potential inhibitors of therapeutically important enzymes, such as cholinesterase, protein tyrosine phosphatase, xanthine oxidase, leucine-transupitase. Structural analogues of chalcones and getaryl chalcones as inhibitors of glutathione-S-transferase, PTP1B and xanthine oxidase have been studied in vitro.

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:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Наукові публікації та процедури присвячені методам синтезу нових біциклічних трифторметилпіролів а також трифторометильованих похідних піролізидину та індолізидину

Назва НТП англійською: Scientific publications and procedures for synthesis of new bicyclic trifluoromethylpyrroles as well as trifluoromethylated derivatives of pyrrolizidine and indolizidine.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: медична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено методики синтезів нових N-(α-трифтороацил)вінілопохідних проліну, піпеколінової кислоти та N-заміщених гліцинів та досліджено циклізації синтезованих сполук в присутності ангідридів і хлорангидридів органічних кислот. Розроблено методики синтезів біциклічних трифторметилпіролів. Вивченно каталітичне гідрування біциклічних трифторометилпіролів та отримани трифторометильовани похідні піролізидину та індолізідину з визначеною стереохімією. Методом комп'ютерного моделювання встановлени потенційні інгібітори терапевтично важливих ферментів, таких як холінестерази, протеїнтирозинфосфатази, ксантиноксидаза, лейцинамінопептидаза та глутатіон-S-трансферази серед трифторометилпіролідинів, трифторометилпіперидинів та трифторометилпіролів.

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: Науково-дослідни установи

Перспективні ринки: Україна

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. 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. 2020. Vol. 61, 151633.

2. Кліпков А.А., Сорочинський О.Є., Тарасенко К.В., Герус І.І. Синтез поліфтороалкіловмісних піролів як будівельних блоків для отримання фторовмісних алкалоїдів піролідинового ряду / Журнал органічної та фармацевтичної хімії. 2020. Т. 18, С. 23-31.

3. Shaitanova E.N., Balabon O.A., Rybakova A.N., Khlebnicova T.S., Lakhvich F.A., Gerus I.I. Synthesis of functionalized fluoroalkyl pyrimidines and pyrazoles from fluoroalkyl enones / J. Fluorine Chem. 2021. Vol. 252, 109905.

4. Кобзар О. Шульга Ю. Рубинов Д. Пашковский Ф. Хлебнікова Т. Лахвич Ф. Сорочинський О. Оцінка похідних 5,5-диметилциклогексан-1,3-діону, що містять арилпропеноїльний фрагмент, як інгібіторів глутатіон-S-трансферази. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / Київ: Інтерсервіс, 2021. С. 45-49.

5. Шайтанова О.М., Сорочинський О.Є., Тарасенко К.В., Герус І.І. Синтез поліфлуороалкілвмісних піролів як будівельних блоків для отримання флуоровмісних алкалоїдів піролідинового ряду. Синтез і біоактивність функціоналізованих азотовмісних гетероциклів / за ред. А.І. Вовка. Київ: Інтерсервіс, 2021. С. 56–83.

X. Заключні відомості

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

Перелік осіб-виконавців

Булденко Владислав Миколайович
(к.х.н., 02.00.10)

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

Кліпков Антон Анатолійович

Кобзар Олександр Леонідович
(к.х.н., 02.00.10)

Шайтанова Олена Миколаївна
(к.х.н., 02.00.10)

Шульга Юрій Васильович

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

