

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100634

Державний реєстраційний номер: 0119U100611

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Розробка методів одержання сполук, що містять фторометиленфосфонатну групу в складі кетофосфонатів та амінофосфонових кислот.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Проміжний 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:

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 3388.362

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез нових фторо- і фосфороорганічних ациклічних та гетероциклічних аналогів природних сполук

Назва роботи англійською:

Synthesis of new fluoro- and phosphoro- organic acyclic and heterocyclic analogs of natural compounds

Реферат українською:

Узагальнено та систематизовано літературні дані щодо синтезу α -кетофосфонатів. Розроблено новий загальний та простий спосіб одержання рацемічних діетилових α -фтор- α -кетофосфонатів. Додавання LDA до розчину діетилфторметилфосфонату та ароматичних, гетероароматичних та аліфатичних етерів у ТГФ при -78 °С дозволило отримати відповідні діетил- α -фтор- α -кетофосфонати з високими виходами. Розроблено синтез раніше невідомої 3,3-дифлуоро-ГАМК з використанням продукту взаємодії етил бромодифлуороацетату та етил вінілового етеру. Розроблено зручний синтетичний метод для одержання мультиграмових кількостей α,α -дифлуоро- α -аміномасляної кислоти – фармакологічно перспективного аналога α -аміномасляної кислоти. Запропоновано простий метод отримання флуорованих аналогів глутамінової кислоти та глутаміну, використовуючи реакцію етил бромодифлуороацетату з α,α -ненасиченими похідними α -амінокислот. Синтезовано ряд дифлуорометиленвмісних енонів, які були використанні для синтезу нових гетероциклічних систем.

Реферат англійською:

Literature data on the synthesis of α -ketophosphonates are generalized and systematized. A new general and simple method for obtaining racemic diethyl α -fluoro- α -ketophosphonates has been developed. Addition of LDA to a solution of diethylfluoromethylphosphonate and aromatic, heteroaromatic and aliphatic ethers in THF at -78 °C allowed to obtain the corresponding diethyl- α -fluoro- α -ketophosphonates in high yields. The synthesis of previously unknown 3,3-difluoro-GABA using the reaction of ethyl bromodifluoroacetate and ethyl vinyl ether has been developed. A convenient synthetic method for multigram synthesis of α,α -difluoro- α -aminobutyric acid - a pharmacologically promising analogue of α -aminobutyric acid was developed. A simple method for producing fluorinated analogs of glutamic acid and glutamine using the reaction of ethyl bromodifluoroacetate with α,α -unsaturated derivatives of α -amino acids is proposed. A number of difluoromethylene-containing enones have been synthesized and used for the synthesis of new heterocyclic systems.

Індекс УДК: 547.1'1, 547.1'1

Коди тематичних рубрик: 31.21.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Герус Ігор Іванович

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 діетил-*p*-фтор-*p*-кетофосфонатів, нових фторовмісних циклічних енонів, алкоксиалкенів, фторовмісних аналогів ГАМК та глутамату, глутаміну.

Назва НТП англійською: Scientific publications and methods of synthesis of diethyl-*p*-fluoro-*p*-ketophosphonates, new fluorine-containing cyclic enones, alkoxyalkens, fluorine-containing analogues of GABA and glutamate, glutamine.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено новий та простий спосіб одержання рацемічних діетилових *p*-фтор-*p*-кетофосфонатів. Розроблено синтез раніше невідомої 3,3-дифлуоро-ГАМК з використанням продукту взаємодії етил бромодифлуороацетату та етил вінілового етеру. Запропоновано ефективний метод мультиграмового синтезу перспективного аналогу ГАМК - *p*, *p* -дифлуоро-ГАМК.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих, НТП спрямоване на синтез і виявлення сполук, перспективних для створення лікарських субстанцій.

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні 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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Logvinenko I.G., Markushyna Y., Kondratov I.S., Vashchenko B.V., Kliachyna M., Tokaryeva Yu., Pivnytska V., Grygorenko O. O., Haufe G. Synthesis, physico-chemical properties and microsomal stability of compounds bearing aliphatic trifluoromethoxy group J. Fluor. Chem, 2020, Vol. 231, P. 109461
2. Bugera M.Ya, Tarasenko K.V., Kondratov I.S., Gerus I. I., Vashchenko B.V., Ivasyshyn V.E. Grygorenko O.O. (Het)aryl difluoromethyl-substituted α -alkoxyenones: synthesis and heterocyclizations . Eur. J. Org. Chem, 2020, Vol. 9, P. 1069-1077.
3. Malashchuk A., Chernykh, A.V., Hurmach V.V., Platonov M.O., Onopchenko O., Zozulya S., Daniliuc C.G., Dobrydnev A.V., Kondratov I.S., Moroz Yu.S. Grygorenko O.O. (Het)aryl difluoromethyl-substituted α -alkoxyenones: synthesis and heterocyclizations. J. Mol. Struct, 2020, 1210, P. 128025-128033.
4. Stepaniuk O.O., Vashchenko B.V., Matvienko V.O., Kondratov I.S., Tolmachev A.A., Grygorenko O.O. Reactions of cyclic α -alkoxyvinyl α -keto esters with heteroaromatic NCC-binucleophiles. Chem. Heterocycl Comp, 2020, Vol. 56(3), P. 377-385.
5. Stepaniuk O.O, Rudenko T.V., Vashchenko B.V., Matvienko V.O., Kondratov I.S., Tolmachev A.A., Grygorenko O.O. Synthesis of Fused Pyridine Carboxylates by Reaction of α -Alkoxyvinyl Glyoxylates with Amino Heterocycles . Synthesis, 2020, Vol. 52(13), P. 1915-1926.
6. Feskov I.O., Golub B.O., Vashchenko B.V, Levterov V. V., Kondratov I.S., Grygorenko O.O., Haufe G. GABA Analogues and Related Mono- α /Bifunctional Building Blocks Derived from the Fluorocyclobutane Scaffold. Eur. J. Org. Chem, 2020, Vol. 30, P. 4755-4767.
7. Bugera M.Ya., Herbeda A.V., Tarasenko K.V., Kondratov I.S. The preparative synthetic approach to α,α -difluoro- α -aminobutyric acid. J. Org. Pharm. Chem., 2020, Vol. 18, 3 (71), P. 55-59.
8. 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, P. 151633
9. 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, Vol. 18, С. 23-31.
10. Gerus I.I, Zhuk Y.I, Kacharova L.M, Rösenthaller G., Shaitanova E.N., Sorochinskii A.E., Vdovenko S. I., Wojcik Y. Uncommon fluorination of enones with xenon difluoride. J. Fluor. Chem, 2020, Vol. 229, P. 109413.
11. Trofymchuk Serhii, Bugera Maksym Ya, Klipkov Anton A, Razhyk Bohdan, Semenov Sergey, Tarasenko Karen, Starova, Viktoriia S Zaporozhets Olga A, Tananaiko Oksana Yu, Alekseenko Anatoliy N, Pustovit Yurii, Kiriakov Oleksandr, Gerus Igor I, Tolmachev Andrei A, Mykhailiuk Pavel K Deoxofluorination of (Hetero) aromatic Acids. J. Org. Chem. 2020 Vol. 85 (5) P. 3110-3124.
12. Trush Maria M., Semenyuta Ivan V., Hodyna Diana, Ocheretniuk Alla D., Vdovenko Sergey I., Rogalsky Sergiy P., Kalashnikova Larisa E., Blagodatny Volodymyr, Kobzar Oleksandr L., Metelytsia Larisa O. Functionalized imidazolium-based ionic liquids: biological activity evaluation. Toxicity screening, spectroscopic, and molecular docking studies. Med. Chem. Research (2020) 29 (12) P. 2181-2191.
13. Romanenko V.D. Rings containing group 15 elements Ref. Mod. Chem. Molecular Sciences. Elsevier, 2020, P.1-36.
14. Trofymchuk Serhii A, V Kliukovskyi Denys, Semenov Sergey V, Khairulin Andrii R, Shevchenko Valerii O, Bugera Maksym Y, Tarasenko Karen V, Volochnyuk Dmitriy M, Ryabukhin Sergey V Semi-Industrial Fluorination of α -Keto Esters with SF₄: Safety vs Efficacy. Synlett, 2020, Vol. 31 (06) P. 565-574.
15. Feskov, I.O., Kondratov I.S., Kuchkovska Yu.O., Naumchyk V.S., Grygorenko O.O. Synthesis of 3-(4-hydroxyphenyl)-cyclobutanecarboxylic acids and evaluation of their derivatives as ligands of GPR-40 receptor Synthesis of 3-(4-hydroxyphenyl)-cyclobutanecarboxylic acids and evaluation of their derivatives as ligands of GPR-40 receptor. J. Org. Pharm. Chem, 2020 Vol.18, 4 (72), P. 14-22.

16. Логвиненко І.Г., Кондратов І.С. Синтез, фізико-хімічні властивості та мікросомальна стабільність аліфатичних трифлуорометоксивмісних сполук. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / за загальною ред.. А.І. Вовка : зб. матеріалів доп. учасн. XXXV Наук. конф. 23 квітня 2020 р. Київ : Інтерсервіс, 2020. С. 125-129.
17. Феськов І.О., Кондратов І.С. Синтез похідних 3-(4-гідроксифеніл)цикло-бутанкарбонових кислот та їх біологічна активність відносно GPR40 Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / за загальною ред.. А.І. Вовка : зб. матеріалів доп. учасн. XXXV Наук. конф. 23 квітня 2020 р. Київ : Інтерсервіс, 2020. С. 164-168.
18. Агунович В.А., Бугера М.Я., Тарасенко К.В., Герус І.І. Синтез та властивості нових п,п-ненасичених дифлуорометилениммісних кетонів. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / за загальною ред.. А.І. Вовка. зб. матеріалів доп. учасн. XXXV Наук. конф. 23 квітня 2020 р. Київ : Інтерсервіс, 2020. С. 12-16.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

д. х. н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Бугера Максим Ярославович

Вдовенко Сергій Іванович

(к.х.н., 02.00.04)

Долованюк Віолетта Геннадіївна

(к.х.н., 02.00.10)

Жук Юрій Іванович

Кліпков Антон Анатолійович

Кондратов Іван Сергійович

(к. х. н., 02.00.10)

Кулик Ірина Броніславівна

(к.х.н., 02.00.10)

Логвиненко Іван Геннадійович

Рибакова Антоніна Вікторівна

Романенко Владислав Демидович

(д.х.н., 02.00.08)

Ручко Євгенія Володимирівна

Сорочинський Олександр Євгенович

(к.х.н., 02.00.03)

Тарасенко Карен Володимирович

(к. х. н., 02.00.03)

Федоренко Олена Андріївна

Феськов Ілля Олександрович

Хільчевський Олександр Миколайович

(к.х.н., 02.00.03)

Шайтанова Олена Миколаївна

(к.х.н., 02.00.10)

Шевченко Ігор Веніамінович

(к.х.н., 02.00.08)

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**

