Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U004104

Державний реєстраційний номер: 0116U006678

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-01-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Структурне керування напрямком реакції. Контрольований синтез як інноваційна основа хімічної технології

Початок етапу: 07.2016

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: +38 044 559 6675, +38 044 559 6686

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут органічної хімії НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон:

Внесок співвиконавця у звітний етап:

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державний фонд фундаментальних досліджень

Код за ЄДРПОУ: 26252928

Місцезнаходження: бул. Шевченка,16, м. Київ, Київська обл., 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442878221

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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 130

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Структурне керування напрямком реакції. Контрольований синтез як інноваційна основа хімічної технології

Назва роботи англійською:

Structural control of the reaction direction. Controlled synthesis as the basis for innovative chemical technology

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - гетарилзаміщені 5-амінопіразоли, гетарилзаміщені піразоло[3,4-с]ізохіноліни, їх синтез та реакції циклізації. Мета роботи - розробка методів синтезу піразоло[3,4-с]ізохінолінів з гетарильними замісниками у піридиновому та бензеновому ядрах; створення комплексу технічних рішень для виробництва сполук з протиракковою та іншими видами активності. Методи дослідження - органічний синтез, ЯМР-, ІЧ-спектроскопія, тонкошарова та об'ємна хроматографія, молекулярний докінг. Опрацьовано препаративні методи синтезу 1- та 3-гетарил-4-(3,4-диметоксіфеніл)-5-амінопіразолів та їх відповідних галоїдпохідних. З використанням методології реакції Пікте-Шпенгера розроблено метод синтезу піразоло[3,4-с]ізохінолінів з гетероциклічними замісниками азинового ряду. Визначено відмінності реакційної здатності гетарильних естерів у реакції ацилювання арилацетонітрилів та запропоновано шляхи розвитку процесів циклізації амінопіразолів в межах сучасних уявлень реакції Шпенгера. Результати роботи можуть бути корисними в препаративній хімії гетероциклічних сполук - біологічноактивних субстанцій та розробки на їх основі нових лікарських засобів. Ключові слова 1,3-Ціанокетон, 4-арил-5-амінопіразол, циклізація, піразоло[3,4-С]ізохінолін, гетерильний замісник, ЯМР, протиракова активність

Реферат англійською:

Object of study - hetaryl sudstituted 5 aminopyrazoles, pyrazolo [3,4-c] isoquinolines, their synthesis and cyclization reactions. Aim of research - to develop methods for the synthesis of pyrazolo [3,4-c] isoquinoline with hetaryl substituents in pyridine and benzenovomu cores; creation of complex engineering solutions for the production of compounds with anti-cancer and other types of activity. Research methods - Organic synthesis, NMR, IR spectroscopy, thin layer chromatography and volume, molecular docking. Processed preparative methods of synthesis of 1- and 3-hetaryl-4- (3,4-dymetoksifenil) -5-aminopirazoliv and their respective haloyidpohidnyh. Using the methodology of response Pictet-Shpenhera the method of synthesis of pyrazolo [3,4-c] isoquinoline with heterocyclic substituents azynovoho series. Detected differences hetarylnyh esters reactivity in acylation reactions arylatsetonitryliv and the ways of cyclization aminopirazoliv processes within the modern ideas of Spengler reaction. The results may be useful in preparative chemistry of heterocyclic compounds - biologically substances and development on the basis of new medicines. Keywords Tsianoketon 1.3-4-aryl-5-aminopirazol, cyclization, pyrazolo [3,4-c] isoquinoline, heterylnyy substituent NMR anticancer activity

Індекс УДК: 547.8, 547.892.4/.8

Коди тематичних рубрик: 31.21.27.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Богза Сергій Леонідович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Регіоселективні методи введення гетероциклічних замісників у систему піразоло[3,4-c]ізохіноліну

Назва НТП англійською: Methods for regioselective introduction of substituents on the heterocyclic system pyrazolo[3,4-c] isoquinoline

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 - Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: З використанням реакції Пікте-Шпенгера розроблено метод синтезу піразоло[3,4-c]ізохінолінів з гетероциклічними замісниками азинового ряду. Визначено відмінності реакційної здатності гетарильних естерів у реакції ацилювання арилацетонітрилів та запропоновано шляхи розвитку процесів циклізації амінопіразолів в межах реакції Шпенгера.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Не визначено

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: науково-дослідні установи

Перспективні ринки: науково-дослідні установи, освітницькі установи

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): Не визначено

Додаткова інформація: За договорами

IX. Бібліографічний опис

1. E.S. Sizonenko, I.K. Kobrakov, V.Y. Popov, S.Y. Suikov, S.LSynthesis of 2-R-2-(1-Aryl-7, 8-Dimethoxy-5H-2, 3-Benzodiazepin-4-yl) Acetic Acid Esters in the Eschenmoser Reaction // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga(SPRINGER) 49 (9), 1352-1357 (2013) 2. O. Kharaneko, V. Popov, S. Bogza4-Aryl-1-hydrazino-5 H-2, 3-

benzodiazepine and 1-aryl-4-hydrazino-5 H-2, 3-benzodiazepine in the synthesis of condensed [1, 2] diazepines. // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga(SPRINGER) 49 (2), 317-324 (2013) 3. O.I. Kharaneko, S.L. BogzaNovel Strategy for the Synthesis of the Pyrrolo [3, 4-d][1, 2] diazepine Heterocyclic System // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga(SPRINGER) 48 (11), 1734-1735 (2013) 4. A.S. Tolkunov, V.N. Baumer, G.V. Palamarchuk, O.V. Shishkin, A.V. MazepaModification of the Pictet-Spengler reaction in the synthesis of fused 2, 3-benzodiazocines // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga(SPRINGER) 47 (8), 1006-1013 (2011) 5. Bogza S.L., Nikolaev O.S., Geleverya A.O., Gurtova K.VSynthesis of pyrimidine analogs homophtalic acid from dimethyl ester acetonedicarboxylate by the Biginelli reaction // Scientific notes of the Tauride National University of Vernadsky. Series Biology, Chemistry 26(4) 307-314 (2013) Tauride National University of Vernadsky 6. Харанеко О.И., Суйков С.Ю., Богза С.Л. Новые гетероциклические системы с 1,2-диазепиновым циклом // Материалы докладов XII научно-практического семинара и Координационного совета НАН Украины; Научные основы создания лекарственных средств". Гурзуф, 28-30.05. 2012.- с.56-64 7. S.Yu. Zinchenko, S.L. Bogza, S.Y. Sujkov, V.V. Pendyukh. HETEROANNELATED ISOQUINOLINES WITH STERICALLY HINDERED PHENOL CORE // Scientific notes of the Tauride National University of Vernadsky. Series Biology, Chemistry 26(4) 270-275 (2013) Tauride National University of Vernadsky 8. С. Л. Богза, И. К. Кобраков, В. Ю. Попов, Е. С. Сизоненко, С. Ю. Суйков1-АРИЛ-4-(2-ОКСОАЛКИЛ)ТИО-2,3(5H)-БЕНЗОДИАЗЕПИНЫ В РЕАКЦИИ ЭШЕНМОЗЕРА // ВІСНИК Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Хімія (rus) 21(1026), вип.21(44) с.122-125 (2012). 9. С.Ю. Зінченко, І.К. Кобраков, В.Н. Кошелев, С.Л. Богза. СИНТЕЗ СПИРОПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛО- И ТИЕНО[3,4-С]ИЗОХИНОЛИНА // Вісник ДоННУ, серія А: Природничі науки 012, №2, с 115-119 10. С.Л. Богза. Новые гетероциклические системы для новых лекарств // Наука та інновації. вид. НАН України, Київ - 2015. - Т. 11, № 6. - С. 85-93.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Попов Анатолій Федорович

Перелік осіб-виконавців

Богдан Н.М.

Бондаренко О.В.

Бородкін Я.С.

Коваль Т.С.

Родигін М.Ю.

Суйков С.Ю.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

