Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U001755

Державний реєстраційний номер: 0119U100724

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Біотестування синтезованих сполук

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, буд. 72, м. Дніпро, Дніпровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380563749800, 380563749850

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 Перемоги, 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 779.234

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Конструювання N,O,S-вмісних гетероциклів із залученням нових каталітичних систем. Експериментальне та теоретичне дослідження

Назва роботи англійською:

Synthesis of N,O,S-containing heterocycles using new catalytic systems. An experimental and theoretical study

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – синтез нових ансамблів N,O,S-гетероциклів, які включають різні комбінації азиридинів, пірролідинів, піперидинів, піранів, 1,3-оксазолідинів, 1,3-оксазолідин-2-онів, триазинохіназолінів, морфолінів та їх карбонілвмісних аналогів, а також 5-6 членних циклічних сульфонів. Мета роботи – розробка практично важливих каталітичних методологій синтезу N,O,S-гетероциклічних сполук у реакціях C-H активації, азиридинування аленів і споріднених систем, 1,3-диполярного циклоприєднання, а також мультикомпонентних циклоконденсацій за участю □-кетосульфонів та їх найближчих похідних. Методи дослідження – спектральні (ІЧ-спектроскопія, спектроскопія ЯМР 1H і 13C, мас-спектрометрія), квантово-хімічні, рентгеноструктурний аналіз. Вперше показано, що реакції вінільного нуклеофільного заміщення мічених дейтерієм біциклічних метиленазиридинів з вінілмагнійбромідом та диметилкупратом літію протікають відповідно до стереохімії SNVл механізму. Запропоновано метод синтезу метиленазиридиносечовин амінолізом 6-метилен-3-окса-1-азабіцикло[3.1.0]гексан-2-онів. Знайдено умови розширення біциклічної системи 3-окса-1-азабіцикло[3.1.0]гексан-2-онів до моноциклічної 5,6-дигідро-2H-1,3-оксазін-2-онової. Удосконалено методологію синтезу нових N,O,S-гетероциклів (похідних циклічних □-кетосульфонів, пірролідинів, тощо) за рахунок розробки нових каталітичних систем на основі органокаталізаторів та сполук перехідних металів. Отримані в роботі результати можуть бути застосованими для створення нових лікарських препаратів з цінними властивостями, а також для вирішення ряду задач теоретичної та експериментальної органічної хімії. Сфера застосування: синтетична органічна хімія, фармацевтична хімія, сільське господарство.

Реферат англійською:

The object of study - the synthesis of new ensembles of N,O,S-heterocycles, which include various combinations of aziridines, pyrrolidines, piperidines, pyranes, 1,3-oxazolidines, 1,3-oxazolidin-2-ones, triazinoquinazolines, morpholines and their carbonyl analogues, as well as 5-6 membered cyclic sulfones. The aim of the work is to develop practically important catalytic methodologies for the synthesis of N,O,S-heterocyclic compounds in CH-activation reactions, aziridination of allenes and related systems, 1,3-dipolar cycloaddition, and multicomponent cyclocondensations with □-ketosulfones and their analogues. Research methods - spectral (IR spectroscopy, 1H and 13C NMR spectroscopy, mass spectrometry), quantum chemical calculations, X-ray diffraction analysis. It has been shown for the first time that vinyl nucleophilic substitution reactions of deuterium-labeled bicyclic methylene aziridines with vinylmagnesium bromide and lithium dimethylcuprate proceed according to the stereochemistry of the SNVл mechanism. A method for the synthesis of methyleneaziridineureas by aminolysis of 6-methylene-3-oxa-1-azabicyclo [3.1.0] hexan-2-ones has been proposed. The conditions for the expansion of the bicyclic system of 3-oxa-1-azabicyclo[3.1.0]hexan-2-ones to the monocyclic 5,6-dihydro-2H-1,3-oxazin-2-one were found. The methodology for the synthesis of new N,O,S-heterocycles (derivatives of cyclic □-ketosulfones, pyrrolidines, etc.) has been improved due to the development of new catalytic systems based on organocatalysts and transition metal compounds. The results obtained in this work can be used to create new drugs with valuable properties, as well as to solve a number of problems of theoretical and experimental organic chemistry. Scope: synthetic organic chemistry, pharmaceutical chemistry, agriculture.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547:544.424

Коди тематичних рубрик:31.21.27, 31.21.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Оковитий Сергій Іванович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

Visible Light-Induced Pd-Catalyzed Alkyl-Heck Reaction of Oximes / N. Kvasovs, V. Iziumchenko, V. Palchykov, V. Gevorgyan // ACS Catal. – 2021. – Vol. 11, № 6. – P. 3749-3754.

Nucleophilic Vinylic Substitution in Bicyclic Methylene Aziridines: SNVл or SNV□? / Palchykov V., Dale P.C., Robertson J. // New J. Chem. – 2021. – Vol. 45, № 20. – P. 9020-9025. https://doi.org/10.1039/D1NJ01458G Impact factor: 3.591 (Scopus, Q1)

Targeting a Cryptic Pocket in a Protein-Protein Contact by Disulfide-Induced Rupture of a Homodimeric Interface / D. Nguyen, X. Xie, S. Jakobi, F. Terwesten, A. Metz, P. Nguyen, V. Palchykov, A. Heine, K. Reuter, G. Klebe // ACS Chem. Biol. – 2021. – Vol. 16, № 6. – P. 1090–1098. https://doi.org/10.1021/acschembio.1c00296 Impact factor: 5.100 (Scopus, Q1)

One-pot reactions of three-membered rings giving N,O,S-heterocycles / V.A. Palchykov, O. Zhurakovskyi // Adv. Het. Chem. – 2021. – Vol. 133. – P. 159-223. https://doi.org/10.1016/bs.aihch.2020.04.001 Impact factor: 4.313 (Scopus, Q1)

Stereoselective organocatalytic construction of spiro oxindole pyrrolidines using unsaturated □-ketoesters and □-ketoamides / T. Peňaška, V. Palchykov, E. Rakovský, G. Addová, R. Šebesta // Eur. J. Org. Chem. – 2021. – № 11. – P. 1693-1703. https://doi.org/10.1002/ejoc.202100022 Impact factor: 3.021 (Scopus, Q1)

Efficient approach for exploring the multiple-channel bimolecular interactions of conformationally flexible reagents. Epoxide ring opening reaction. Borysenko, I.O., Sviatenko, L.K., Okovytyy, S.I., Leszczynski, J. Structural Chemistry – 2021. – Vol. 32, № 2. – P. 581–589. https://doi.org/10.1007/s11224-020-01663-o

1,3-Amino alcohols and their phenol analogs in heterocyclization reactions (chapter 4) / V.A. Palchykov, A.A. Gaponov // Advances in Heterocyclic Chemistry (Ed.: Eric F.V. Scriven, Christopher A. Ramsden). Elsevier Inc., 2020, vol. 131, pp. 285-350. http://dx.doi.org/10.1016/bs.aihch.2019.06.001

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Оковитий Сергій Іванович
д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Борисенко Ірина Олександрівна
(молодший науковий співробітник)

Вайнілович Ірина Вікторівна

Гапонов Олександр Олексійович
(к. х. н., 02.00.03)

Глушков Віталій Миколайович
(д. ф.-м. н., 01.04.20)

Дідур Олег Олексійович
(к. б. н., 03.00.16)

Коваленко Валерій Сергійович
(к. х. н., 02.00.04)

Лихолат Юрій Васильович
(д. б. н., 03.00.16)

Оковитий Сергій Іванович
(д. х. н., 02.00.03)

Пальчиков Віталій Олександрович
(д. х. н., 02.00.03)

Святенко Людмила Костянтинівна
(д. х. н., 02.00.04)

Сергеєва Тетяна Юріївна
(д.філософ, 02.00.03)

Стець Надія Вікторівна
(к. х. н., 02.00.04)

Феденко Володимир Савелійович
(к. х. н., 02.00.03)

Хромих Ніна Олександрівна
(к. б. н., 03.00.16)

Шевченко Людмила Василівна
(к. х. н., 02.00.04)

Юрко Ольга Юріївна

Відповідальний за підготовку облікових документів — Терзі Н. В.

Телефон — +38 (097) 499-46-87

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

