

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U000726

Державний реєстраційний номер: 0120U100153

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-01-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Розробка нових шляхів отримання та функціоналізація ізомерних імідазопіримідинів

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього 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 Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження: Харківське шосе, буд. 50, м. Київ, Київська обл., 02160, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442923032

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: Кабінет міністрів

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1580.883

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка нових шляхів отримання різнозаміщених бензотіазолів, бензоксазолів, оксазолопіридинів, тіазолопіридинів, імідазопіримідинів і модифікація їх структур шляхом перетворення функціональних груп

Назва роботи англійською:

Development of new ways of obtaining substituted benzothiazoles, benzoxazoles, oxazolopyridines, thiazolopyridines, imidazopyrimidines and modification of their structures by transformation of functional groups

Реферат українською:

У результаті виконаних досліджень розроблено зручний шлях синтезу імідазо[1,5-а]піримідинів шляхом циклізації отриманих *in situ* 5-аміноімідазолів з різними малондіальдегідами або 1,3-дикетонами. Досліджено синтетичні межі цієї реакції в залежності від реагентів, умов реакції, що дає можливість широкого варіювання замісників у піримідиновому циклі. Виявлено нове C-N/C-C-перегрупування імідазо[1,5-а]піримідину в 3H-імідазо[4,5-b]піридинове ядро, яке протікає в кислому середовищі. Запропоновано вірогідний механізм перегрупування. Здійснено зустрічний синтез отриманих сполук. Вивчено карбонілювання 6-бромімідазо[1,2-а]піримідину і 6-бромімідазо[4,5-b]піридину окисом вуглецю в присутності [1,1'-біс(дифенілфосфіно)-фероцен]дихлорпаладію (Pd(dppf)Cl₂), що привело до синтезу метил імідазо[1,2-а]піримідин-6-карбоксилату і метил імідазо[4,5-b]піридин-6-карбоксилату. Синтезовано великий масив імідазо[1,5-а]піримідинів і імідазо[1,2-а]піримідинів, що містять як замісники карбонові кислоти в різних положеннях імідазо[1,5-а]піримідинів і імідазо[1,2-а]піримідинів і які можуть бути використані для створення нових лікарських препаратів. Встановлено можливість селективного відновлення етил імідазо[1,5-а]піримідин-3-карбоксилату і імідазо[1,2-а]піримідин-6-карбоксилату воднем над Pd/C, що приводить до 1,2-дигідропохідних імідазо[1,5-а]піримідинів і імідазо[1,2-а]піримідинів.

Реферат англійською:

As a result of the performed research, a convenient way of synthesis of imidazo[1,5-a]pyrimidines by cyclization of *in situ* obtained 5-aminoimidazoles with various malondialdehydes or 1,3-diketones was developed. The synthetic limits of this reaction depending on the reagents and reaction conditions were studied, which makes it possible to widely vary the substituents in the pyrimidine cycle. A new C-N/C-C rearrangement of imidazo[1,5-a]pyrimidine into 3H-imidazo[4,5-b]pyridine core, which occurs in an acidic medium, was revealed. A probable mechanism of rearrangement is proposed. Counter synthesis of the obtained compounds was carried out. The carbonylation of 6-bromoimidazo[1,2-a]pyrimidine and 6-bromoimidazo[4,5-b]pyridine with carbon monoxide in the presence of [1,1'-bis(diphenylphosphino)ferrocene]dichloropalladium (Pd(dppf)Cl₂), which led to the synthesis of methyl imidazo[1,2-a]pyrimidine-6-carboxylate and methyl imidazo[4,5-b]pyridine-6-carboxylate. A large array of imidazo[1,5-a]pyrimidines and imidazo[1,2-a]pyrimidines containing carboxylic acid substituents in various positions of imidazo[1,5-a]pyrimidines and imidazo[1,2-a]pyrimidines was synthesized and which can be used to create new drugs.

Індекс УДК: 547, 547.78'83'859+547-32

Коди тематичних рубрик: 31.21.01

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Толкунов Сергій Володимирович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Загальний підхід до синтезу різнозаміщених імідазо[1,5-а]піримідинів і імідазо[1,2-а]піримідинів шляхом циклізації аміноімідазолів з 1,3-дieleктрофілами. Загальний підхід до синтезу метил імідазо[1,2-а]піримідин-6-карбоксилату і метил імідазо[4,5-б]піридин-6-карбоксилату шляхом карбонілювання відповідних бром похідних.

Назва НТП англійською: General approach to the synthesis of variously substituted imidazo[1,5-a]pyrimidines and imidazo[1,2-a]pyrimidines by cyclization of aminoimidazoles with 1,3-dielectrophiles. General approach to the synthesis of methyl imidazo[1,2-a]pyrimidine-6-carboxylate and methyl imidazo[4,5-b]pyridine-6-carboxylate by carbonylation of the corresponding bromo derivatives.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проєкт спрямований на вирішення фундаментальної проблеми, пов'язаної з розробкою нових методів синтезу похідних імідазопіримідинів та одержанням нових матеріалів із корисними властивостями. Корисність пов'язана в першу чергу з тим, що похідні імідазопіримідинів знаходять широке застосування у медичній практиці як лікарські препарати. Проєкт пов'язаний з розробкою нових методів синтезу різнозаміщених похідних імідазо[1,5-а]піримідинів і імідазо[1,2-а]піримідинів, а також функціоналізацією цих похідних з використанням реакції паладій-каталізованого карбонілювання бром похідних імідазопіримідинів. Запропоновано загальний підхід до синтезу похідних імідазо[1,5-а]піримідинів і імідазо[1,2-а]піримідинів, заснований на кислотно-каталізованій гетероциклізації похідних аміноімідазолів. Досліджено синтетичні межі цих реакцій у залежності від реагентів, умов реакції, що дає можливість широкого варіювання замісників. Виявлено нове C-N/C-C-перегрупування імідазо[1,5-а]піримідину в 3H-імідазо[4,5-б]піридинове ядро, яке протікає в кислому середовищі. Запропоновано вірогідний механізм перегрупування.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Перспективні речовини для створення нових лікарських препаратів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка НАН України

Перспективні ринки: Не визначено

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:

ІХ. Бібліографічний опис

1. Convenient synthesis of imidazo[1,5-a]pyrimidine derivatives and unusual C/N to C/C recyclization into 3H-imidazo[4,5-b]pyridine / V.S. Tolkunov, et.al. // Chem. Heterocycl. Comp. 2021, Vol.57, №5. P. 554–559.
2. Спосіб одержання похідних імідазо[1,5-а]піримідинів Толкунов С.В., Толкунов А.С., Толкунов В.С., Смирнова О.В. Патент UA 148496 11.08.2021. Бюл.32.
3. Спосіб одержання похідних метил 1,3-бензотіазол-2-карбоксилату: Пат №157297 Україна : C07D 277/62 / С.В. Толкунов, В.С. Толкунов, О.В. Смирнова, А.С. Толкунов. -№ u 202401569; заявл. 27.03.2024; опубл. 25.09.2024, Бюл. №39.
4. Спосіб синтезу похідних N-(1,3-бензотіазол-2-іл)гліцинів: Пат №156889 Україна : C07D 277/62 / С.В. Толкунов, В.С. Толкунов, О.В. Смирнова, А.С. Толкунов. - № u202400882; заявл. 21.02.2024; опуб. 14.08.2024, Бюл. 33.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попов Анатолій Федорович

д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Богза Сергій Леонідович

(д. х. н., 02.00.03)

Лавриненко Андрій Андрійович

Савицький Павло Володимирович

(к. х. н.)

Смирнова Ольга Володимирівна

Толкунов Андрій Сергійович

(к. х. н.)

Толкунов Валерій Сергійович

(к. х. н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Коновкіна Ольга Анатоліївна

Телефон

+38 (095) 408-59-49

Реєстратор

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

