

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U004501

Державний реєстраційний номер: 0116U002559

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-02-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вичерпний літературний пошук, розробка цільових методик синтезу конденсованих гетеросистем. Попередні фізико-хімічні дослідження.

Початок етапу: 03.2016

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 521-32-05

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: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201290

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1886.7

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дизайн, синтез та дослідження нових гетероциклічних сполук для створення перспективних лікарських засобів з широким спектром дії

Назва роботи англійською:

Design, synthesis and study of new heterocyclic compounds to create promising drugs with a wide spectrum of action

Реферат українською:

Звіт про НДР: 102 с., 109 рис., 3 табл., 1 додаток, 124 джерела. Об'єкт дослідження: нітроген-, оксиген- та сульфурвмісні гетеросистеми. Мета роботи: Пошук та розробка оптимальних препаративних методів синтезу, дослідження будови, фізико-хімічних та хімічних особливостей нових О-, S-, N-вмісних гетероциклічних систем та карбоциклічних систем з активними функціональними групами і широким спектром корисної дії для вирішення актуальних задач медицини, біології, нанотехнології та фотоніки. Методи дослідження: методи синтезу модельних органічних сполук, гетероциклічних сполук; ЯМР-, ІЧ-, УФ-, флуоресцентна спектроскопія; мас- та хроматомас-спектрометрія; методи синтезу під високим тиском та в інертній атмосфері; рентгеноструктурний та елементний аналіз. Проведено вичерпний літературний пошук з методів синтезу ізо-тіазолідин-1,1-діонів та ізотіазолін-2,2-діонів; методів синтезу, властивостей та біологічної активності 3-гетарилхроман-4-онів; методів гетероциклізації на основі -галогено- -ненасичених кетонів гетероциклічного ряду; визначено найбільш перспективні об'єкти для подальшого застосування в синтезі гетероциклів. Розроблено ефективні методи синтезу похідних 6-ізотіазолідину та вивчено їх реакції ацилювання, конденсації, бромовання та відновлення; методи синтезу тіадіазольних аналогів ізофлавонів та проведено модифікацію 7-гідрокси-3-(5-феніл-1,3,4-тіадіазол-2-іл)-6-етилхромону; неофлавонів з N-вмісними гетероциклами та досліджено протиракову активність адуктів Дільса-Альдера в ряду пірано-[2,3-h]ізофлавонон; 2-(1H-піразол-3-іл)фенолів; 3-арил-3,4-дигідроізокумари-нів, що містять фрагменти природних амінокислот; підходи до анелювання піранового циклів до ядер хромону, кумарину та ізокумарину; біологічно активних похідних піролідину і піролідону та виявлено їх більшу ефективність проти росту *Mycobacterium tuberculosis* чим GEQ. Досліджено взаємодію алоперину з гліцидиловими ефірами ізофлавонів. Знайдено методи введення трифлуорометильної групи до складу фуранів, хінолінів та їх гетероароматичних аналогів. На основі розроблених методом молекулярного докінгу фармакофорних моделей проведено синтез гетероциклічних карбоксиамідинів з метою створення потужних антагоністів протон-чутливих каналів. Результати НДР впроваджено: в навчальний процес хімічного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Реферат англійською:

The report on the research: 102 p., 109 Figures, 3 Tables, 1 application source, 124 references. The object of study: nitrogen-, oxygen- and sulfurcontaining heterocycles. Objective: To search and develop the optimum formulations of synthesis methods for studying the structure, physical and chemical features of the new O-, S-, N-containing heterocyclic systems and carbocyclic systems with active functional groups and a wide range of performance to address the actual problems of medicine, biology, nanotechnology and photonics. Methods: Methods for the synthesis of model organic compounds, heterocyclic compounds; NMR, IR, UV, fluorescence spectroscopy; mass spectrometry and gas chromatography; Methods of synthesis at high pressure and under an inert atmosphere; X-ray diffraction and elemental analysis. A comprehensive literature search on the synthesis of isothiazolidine-1,1-diones and isothiazolin-2,2-diones, methods of synthesis, properties, and biological activity of 3-hetarylhroman-4-ones, methods of heterocyclization based on -halo- -unsaturated ketones heterocyclic series were carried out. The most promising sites were identified for further use in the synthesis of heterocycles. The effective methods

for the synthesis were developed for: 2,6-isothiazolidines and studied their reactions of acylation, condensation, bromination and reduction; thiadiazole analogs of isoflavones and held modification 7-hydroxy-3-(5-phenyl-1,3,4-thiadiazol-2-yl)-6-ethylchromone, neoflavones with N-containing heterocycles and studying of anticancer activity of Diels-Alder adducts in a pyrano[2,3-h]isoflavone series; 2-(1H-pyrazol-3-yl)phenoles; 3-aryl-3,4-dihydroisocoumarines with fragments of naturally occurring amino acids; approaches to annulation of pyrane ring cores to chromone, coumarine and isocoumarine; biologically active derivatives of pyrrolidine and pyrrolidone and found them most effective against the growth of Mycobacterium tuberculosis than GEQ. The interaction of aloperine with glycidyl ethers of isoflavones was studied. The methods of administration of trifluoromethyl group in the furane, quinoline and their heteroaromatic analogues were found. The synthesis of pharmacophore models (heterocyclic carboxyamidines) to create powerful antagonists, proton-sensitive channels was performed on the basis of molecular docking method. The results of research are introduced in the educational process of the Faculty of Chemistry of the Kyiv National Taras Shevchenko University.

Індекс УДК: 547.71, 547.7

Коди тематичних рубрик: 31.17.15.21

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Хиля Володимир Петрович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методи синтезу O-, S-, N-вмісних гетероциклів, їх карбо- та спіроаналогів.

Назва НТП англійською: Synthesis O-, S-, N-containing heterocyclic, carboxylic and their spiroanalohiv.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблені та відпрацьовані методики синтезу дали можливість одержати нові складнооксидні сполуки на основі різнозаряджених аніонів (фосфати, ванадати, борати, молібдати, вольфрамати), сполуки та ізоморфнозаміщені фази із шаруватою перовськітоподібною структурою, різнометалічні (різнолігандні) координаційні сполуки перехідних металів з O-, N-, S-донорними лігандами. Вперше одержані сполуки з гетероблочною шаруватою структурою, яка містять чотири- та двошаровий перовськітоподібні блоки сполук типу $ApBpO_{3n+2}$. Зміна природи лужного та тривалентного металів в системах $MI_2O-P_2O_5-TiO_2-MIII_2O_3$ дозволила розширити можливості одержання як нових сполук, так і модифікувати відомі. Нові сполуки, одержані за розробленими та відпрацьованими методиками, придатні для розробки каталізаторів, люмінофорів, діелектричних, сегнетоелектричних, резистивних, високотемпературних надпровідних, нелінійно-оптичних, фотокаталітичних, фотовольтаїчних матеріалів та біологічно активних препаратів та матеріалів, що сприятиме підвищенню

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2016

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: наука, навчальний процес

Перспективні ринки: Україна та інші країни

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мартинюк Віктор Семенович

Перелік осіб-виконавців

Єгорова Т.В.

Бойко О.М.

Бійцева А.В.

Горбуленко Наталія Василівна
(к. х. н.)

Добриденев О.В.

Кисіль А.І.

Кіндер Т.Д.

Левков І. В.

Любчук Т.В.

Матвіюк Т.В.

Москвіна В.С.

Пласконь А.С.

Потіха Л.М.

Тарасюк Т. М.

Хиля В.П.

Цапко М.Д.

Шилін С.В.

Шокол Тетяна Віталіївна
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

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

