# Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0221U102310

**Державний реєстраційний номер:** 0119U100724

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 01-02-2021

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 2

**Назва етапу:** Дизайн каталізаторів для контролю енантіоселективності реакцій

**Початок етапу:** 01.2020

**Закінчення етапу:** 12.2020

**Вид звітного документа:** Проміжний 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:** просп. Перемоги, буд. 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)

**Напрям фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

**7713 - кошти держбюджету**

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 2201020

| |
|---|
| **Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):** 926.2 |

## 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), квантово-хімічні. Вперше досліджено механізм реакції 1,2,3-бензотриазолів з аленами, яка каталізована Rh-дифосфіновим лігандом. Незалежно від використовуваного ліганду реакція протікає через триступеневий каталітичний цикл (окиснювальне приєднання, гідрометалювання, відновлювальне відщеплення). Перевага для N2-селективної реакції виникає внаслідок невідомого електронного механізму, а саме, більш стабілізуючої електростатичної взаємодії між збагаченою електронами областю в атомі N1 одного з таутомерів з позитивно зарядженим атомом Rh при утворенні зв'язку N1-Rh на етапі окиснювального приєднання N1-H, що визначає швидкість реакції. Вперше отримані стереохімічно чисті гідроксиіміни ряду сульфолану, оцінено можливості їхнього застосування як каталізаторів/лігандів. Встановлено, що при взаємодії цис- і транс-4-аміно-3-гідроксисульфоланів з ароматичними альдегідами в усіх випадках спостерігається утворення відповідних віц-гідроксиімінів, для яких характерні різні таутомерні форми залежно від структурних особливостей та природи розчинника. Результати можуть бути застосованими для створення нових лікарських препаратів, а також для вирішення задач теоретичної та експериментальної органічної хімії. Галузі застосування: синтетична органічна хімія, фармацевтична хімія, сільське господарство.

### Реферат англійською:

Object of study-synthesis of new ansambles of N,O,S-heterocycles, which include different combinations of aziridines, pyrrolidines, piperidines, pyranes, 1,3-oxazolidines, 1,3-oxazolidin-2-ones, triazinoquinazolines, morpholines and their carbonyl-containing analogs, as well as 5-6 membered cyclic sulfones. The purpose of work is the development of practically important catalytic methodologies for the synthesis of N,O,S-heterocyclic compounds in the reactions of C-H activation, aziridination of allenes and related systems, 1,3-dipolar cycloaddition, as well as multicomponent cyclocondensations of □-ketosulfones. Methods of study- spectral (IR-spectroscopy, 1H and 13C NMR spectroscopy), quantum-chemical. We have analyzed the reaction mechanism of a coupling of 1,2,3-benzotriazoles with allenes catalyzed by Rh-diphosphine ligand. Regardless of the ligand being used, the reaction proceeds via a three-step catalytic cycle (oxidative addition, hydrometalation, reductive elimination). The preference for the N2-selective reaction channel arises from a unrecognized electronic mechanism, namely, a more stabilizing electrostatic interaction between the electron-enriched region at the N1 atom of one of tautomers with the positively charged Rh during N1-Rh bond formation in the rate-determining N1-H oxidative addition step. For the first time, stereochemically pure hydroxyimines of the sulfolane series were obtained, and the possibilities of their use as catalysts/ligands were evaluated. When interacting of cis- and trans-4-amino-3-hydroxysulfolanes with aromatic aldehydes, in all cases, the formation of the corresponding vicinal

hydroxyimines is observed. Compounds are characterized by different tautomeric forms depending on the structural features and nature of the solvent. The results can be used to create new drugs, as well as to solve problems of theoretical and experimental organic chemistry.Areas of application: synthetic organic chemistry, pharm. 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)

**Назва НТП українською:** Методика синтезу нових бензотриазолів для створення біологічно активних препаратів

**Назва НТП англійською:** Method for the synthesis of novel benzotriazoles for the development of biologically active substances

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** Синтетична органічна хімія, фармацевтична хімія.

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Розроблено високо N2-селективний метод синтезу бензотриазолів за допомогою каталітичної системи родій/DPEphos. Регіокомплементарне алілювання бензотриазолів по атому N1 також було досягнуто із значним виходом та високою селективністю за допомогою каталітичної системи родій/JoSPOphos. За допомогою цього ефективного способу синтезовано нові N2- і N1-алільовані бензотриазоли із біологічною активністю. Метод може розширити застосування алкілзаміщених бензотриазолів у фармацевтичній та медичній хімії. На основі розрахунків методом теорії функціоналу густини показано, що незалежно від використовуваного ліганду реакція протікає через триступеневий каталітичний цикл (окиснювальне приєднання, гідрометалювання, відновлювальне відщеплення). Особливості будови нових гетероциклічних похідних встановлено з використанням сучасних одно- та двовимірних методів ядерного магнітного резонансу.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** 01.2020

**Закінчення етапу:** 12.2020

**Споживачі продукції:** Інститут органічної хімії НАН України, м. Київ, Інститут біоорганічної та нафтохімії НАН України, м. Київ, Enamine Ltd., м. Київ, Укроргсинтез, м. Київ, Дніпровська медична академія, м. Дніпро, НТК «Інститут монокристалів» НАН України, м. Харків

**Перспективні ринки:** Естонія, Польща, Словаччина

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**

**Права, що надаються інвестору після завершення роботи:**

**Наявність бізнес-плану:** Ні

**Техніко-економічне обгрунтування:** Ні

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**

**Очікуваний термін окупності (років):**

**Додаткова інформація:**

## IX. Бібліографічний опис

Sergeieva T. Ligand-Mediated Regioselective Rhodium-Catalyzed Benzotriazole–Allene Coupling: Mechanistic Exploration and Quantum Chemical Analysis / T. Sergeieva, T.A. Hamlin, S. Okovytyy, B. Breit, F.M. Bickelhaupt // Chem. Eur. J. – 2020. – Vol. 26, №11. – P. 2342–2348

Xu K. Unlocking the N2 Selectivity of Benzotriazoles: Regiodivergent and Highly Selective Coupling of Benzotriazoles with Allenes / K. Xu, N. Thieme, B. Breit //Angew. Chem. Int. Ed. – 2014. – Vol. 53, № 28. – P. 7268-7271

Landert H. Chiral Mixed Secondary Phosphine□Oxide–Phosphines: High□Performing and Easily Accessible Ligands for Asymmetric Hydrogenation / H. Landert, F. Spindler, A. Wyss et al. // Angew. Chem. Int. Ed. – 2010. – Vol. 49, № 38. – P. 6873-6876

Grimme S. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu / S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich et al. // J. Chem. Phys. – 2010. – Vol.132, № 15. – P. 154104

Gellrich U. Mechanistic investigations of the rhodium catalyzed propargylic CH activation / U. Gellrich, A. Meissner, A. Steffani et al. // J. Am. Chem. Soc. – 2014. – Vol.136, № 3. – P. 1097-1104

## X. Заключні відомості

**Керівник юридичної особи** Поляков Микола Вікторович
д. ф.-м. н., 01.02.05

**Перелік осіб-виконавців**

Дідур Олег Олексійович
(к. б. н.)

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

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

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

Хромих Ніна Олександрівна
(к. б. н.)

**Відповідальний за підготовку облікових документів** Оковитий С.І.

**Телефон** +38 (050) 591-92-76

**Реєстратор**

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

