

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U032711

Державний реєстраційний номер: 0123U104256

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-12-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Скринінг реакційної здатності ключового прекурсора ($B_{10}H_{12}(S(CH_3)_2)_2$) у реакціях з ацетиленами, що містять різні замісники та скринінг отриманих дизаміщених о-карборанів в реакції ізомеризації у м- та п-похідні. Дизайн бібліотеки о-карборанів, які є аналогами відомих біологічно активних молекул, що містять о-заміщений бензеновий фрагмент. Дериватизація о-карборанів; синтез аналогів біологічно активних сполук на основі о-карборанів з використанням напівпаралельного підходу; масштабований синтез м- і п-карборанів; створення бібліотеки м- і п-карборанів, які є аналогами відомих біологічно активних молекул з м- і п-заміщеним бензеновим фрагментом. Синтез м- і п-карборанів, які є аналогами біоактивних сполук; ADME/ПК профілювання о-карборанів, які є аналогами відомих біологічно активних сполук; дериватизація м- і п-карборанів. ADME/ПК профілювання м- і п-карборанів, які є аналогами відомих біологічно активних сполук. Фіналізація проекту.

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 органічної хімії
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 5, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445527150, 380445510613, 380445732643

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2684.116

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка напівпромислових протоколів синтезу функціралізованих карборанів – перспективної платформи для біомедичного застосування

Назва роботи англійською:

Development of semi-industrial protocols for the synthesis of functionalized carboranes – a promising platform for biomedical applications

Реферат українською:

Проект спрямовано на створення надійного та екологічного лабораторного циклу для мультиграмового синтезу функціоналізованих карборанів, з використанням широко доступних реагентів, що є важливим для використання карборанових похідних для MedChem досліджень та для потреб матеріалознавства. Буде проведено поглиблені дослідження з метою розробки масштабованих протоколів для синтезу функціоналізованих карборанів. Також будуть синтезовані ряди карборанів, що містять різні функціональні групи. Кожна хімічна стадія буде оптимізована для напівпромислового масштабування. Практичні спостереження будуть підкріплені DFT дослідженнями властивостей і реакційної здатності карборанів. Ряд білдинг-блоків (BB) з карборановим ядром буде синтезовано в мультиграмових кількостях. На основі синтезованих у дослідженні BB будуть створені комбінаторні бібліотеки сполук для потреб медичної хімії. Будуть досліджені основні фізико-хімічні та біологічні властивості важливих для медичного застосування карборанів.

Реферат англійською:

The project aims to create the reliable and environmentally-friendly laboratory cycle for multigram synthesis of functionalized carboranes starting from commonly used bulk chemicals, which is important for the use of the carborane units for MedChem research and for the needs of material science. In-depth studies will be conducted in order to develop scalable protocols for the synthesis of functionalized carboranes. A series of carboranes with various functional groups will be prepared. Each chemical step will be optimized for semi-industrial scale-up. The practical observations will be supported by DFT studies of carboranes properties and reactivity. A set of building blocks (BB) with carborane core will be synthesized in multigram quantities. Small combinatorial libraries of compounds for MedChem applications will be created based on the previously synthesized carborane BB. The basic physicochemical and biological properties of the MedChem-relevant carborane molecules will be studied.

Індекс УДК: 547.52/.68, 547 , 547.7/.8 , 547.1'1 , 547.6, 547.64, 547.333

Коди тематичних рубрик: 31.21.25, 31.21, 31.21.27, 31.21.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Рассукана Юлія Вікторівна

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Розробка напівпромислових протоколів синтезу функціоналізованих карборанів – перспективної платформи для біомедичного застосування

Назва НТП англійською: Development of semi-industrial protocols for the synthesis of functionalized carboranes – a promising platform for biomedical applications

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, Методичні документи

Галузь застосування: Органічна хімія, медична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проект спрямовано на створення надійного та екологічного лабораторного циклу для мультиграмового синтезу функціоналізованих карборанів, з використанням широко доступних реагентів, що є важливим для використання карборанових похідних для MedChem досліджень та для потреб матеріалознавства. Буде проведено поглиблені дослідження з метою розробки масштабованих протоколів для синтезу функціоналізованих карборанів. Також будуть синтезовані ряди карборанів, що містять різні функціональні групи. Кожна хімічна стадія буде оптимізована для напівпромислового масштабування. Практичні спостереження будуть підкріплені DFT дослідженнями властивостей і реакційної здатності карборанів. Ряд білдинг-блоків (ВВ) з карборановим ядром буде синтезовано в мультиграмових кількостях. На основі синтезованих у дослідженні ВВ будуть створені комбінаторні бібліотеки сполук для потреб медичної хімії. Будуть досліджені основні фізико-хімічні та біологічні властивості важливих для медичного застосування карборанів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Економія енергоресурсів, Підвищення продуктивності праці

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 03.2024

Закінчення етапу: 11.2024

Споживачі продукції: Інститут органічної хімії, Єнамін, УОС, Національний університет України ім.Т.Г.Шевченка, Київський політехнічний інститут

Перспективні ринки:

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:

IX. Бібліографічний опис

Рассукана Ю.В., Лега Д.О., Субота А.І., Штиль Н.А., Митюк А.П., Нечаєв М.А. Спосіб одержання декаборану(14) B10H14 // заявка на Патент України на корисну модель u 2023 06284

Рассукана Ю.В., Міщенко А.М., Сацька Ю.А., Конишева К.М., Турченко В.В., Смалій Р.В. Спосіб одержання тетрагідроборату тетраетиламонію високої чистоти // заявка на Патент України на корисну модель u 2023 06285

1. Mishchenko A.M., Lishchenko Y.L., Kozytskiy A.V., Konysheva K.M., Satska Y.A., Ryabukhin S.V., Volochnyuk D.M., Kolotilov S.V., Rassukana Y.V. Preparation of closo-decaborate by pyrolysis of tetraethylammonium borohydride: revision and optimization for large-scale production // ChemRxiv, <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-hrc1c>

2. Mishchenko A.M., Kozytskiy A.V., Lishchenko Y.L., Smaliy R.V., Shtil N.A., Subota A.I., Mityuk A.P., Nechayev M.A., Leha D.O., Rassukana Y.V. A new convenient method for preparation of tetrabutylammonium closo-dodecaborate // J.Org. and Pharm.Chem. 2024, 22 (4), 3 – 9 p. <https://doi.org/10.24959/ophcj.24.316264>

3. Svaliavyn O.V., Mishchenko A.M., Lishchenko Y.L., Mityuk A.P., Cherednichenko A.S., Shtil N.A., Turcheniuk V.V., Smaliy R.V., Rassukana Y.V., Pashenko O.Ye, Reevaluating ortho-Carborane Synthesis: Success with Mono-Substituted Acetylenes in Presence of Silver Salts // J.Org. and Pharm.Chem. 2024, 22 (3), 38 – 45p. <https://doi.org/10.24959/ophcj.24.316200>

4. Olexandr Ye. Pashenko^{1,2,3}, Yuliya V Rassukana,² Dmytro M. Volochnyuk,^{1,2,3} Serhiy V. Ryabukhin^{1,2}, Ortho-Carborane Preparation: Traditional Methods and Recent Innovations // ChemRxiv, <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-hrc1c>

5. Mishchenko A.M., Kozytskiy A.V., Lishchenko Y.L., Smaliy R.V., Subota A.I., Leha D.O., Shtil N.A., Mityuk A.P., Nechayev M.A., Rassukana Y.V., Ryabukhin S.V. Influence of borohydrides pyrolysis conditions on closo-dodecaborane formation // ChemRxiv, <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-jb3fb>

8. Міщенко А., Рассукана Ю. Александрова А, Чередніченко А., Свалявин О., Штиль Н., СПОСІБ ОДЕРЖАННЯ 1-ФЕНІЛКАРБОРАНУ, Заявка на корисну модель України

9. Rassukana Y.V., Mishchenko A.M., Nechayev M.A., Lishchenko Y.L., Kolotilov S.V., Ryabukhin S.V., Volochnyuk D.M., Comparison of synthetic routes to decaborane dianion [B10H10]²⁻ – the key precursor for carboranes // ACS, New Reaction&Methodology, CONTROL ID: 4109993.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Михайло Володимирович
д.х.н., член-кор.НАН України, 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Конишева Катерина Михайлівна
(к.х.н.)

Лега Дмитро Олександрович
(к.фарм.н.)

Митюк Андрій Петрович
(к.х.н.)

Міщенко Артем Максимович
(к.х.н.)

Нечаєв Максим Андрійович
(к.х.н.)

Сацька Юлія Анатоліївна
(к.х.н.)

Смалій Радомир Володимирович
(к.х.н.)

Субота Андрій Іванович
(к.х.н.)

Турченко Володимир Володимирович
(к.х.н.)

Штиль Наталія Анатоліївна
(к.х.н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Герасим'юк Ірина

Телефон

+38 (097) 689-76-65

Реєстратор

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

