Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U031560

Державний реєстраційний номер: 0122U001810

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-05-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дослідження перебігу орбітально контрольованих реакцій.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного 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: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442393333, 380442393230

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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 960.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Орбітально контрольовані реакції карбо- і гетероциклів для медичної хімії та сталого розвитку.

Назва роботи англійською:

Orbitally controlled reactions of carbo- and heterocycles for medical chemistry and sustainable development.

Реферат українською:

Розроблено ефективний препаративний метод синтезу цілеспрямованого синтезу флуоровмісних піразолів. Срібно-етиленові комплекси представляють особливий інтерес, оскільки срібло використовується для часткового окислення етилену, який є основним промисловим процесом. Їх важко стабілізувати та вони досить лабільні через відносно слабкий зв'язок срібло(I)–етилен. Використання створених нами нових флуоровмісних піразолів як лігандів у координаційній хімії дало змогу вперше стабілізувати незвичайний триядерний срібно-етиленовий комплекс у кристалічному стані, а також одержати два безпрецедентних двоядерних срібно-етиленових комплекса з містковими піразолатами. 2. Створено препаративний безметалевий двостадійний метод синтезу тризаміщених CF3-циклопропанів, цікавих для пошуку нових лікарських засобів. Основні недоліки відомих методів – це залучення сильних органічних або мінеральних основ, які накладають обмеження на обсяг реакції, низька атомна економія і використання дорогих металевих каталізаторів. Створений нами метод синтезу не має цих обмежень і обмежений лише реакційною здатністю вихідного алкену, має високу толерантність до різних функціональних груп та масштабованість. 3. Раніше ми вперше показали, що відповідні заміщені похідні 2-азаспіро[3.3]гептану є біоізостерами піперидину: заміна піперидинового фрагменту у місцевому анестетику бупівакаїну на 2-азаспіро[3.3]гептан-1-карбонову кислоту привело до посилення активності аналогу з більшою тривалістю дії, а заміна на 7-окса-2-азаспіро[3.5]нонан-1-карбонову кислоту привело до зменшення токсичності та збільшенню розчинності у воді при збереженні активності, співставної з оригіналом. Продовжуючи наші дослідження, ми розширили коло об'єктів, на даний момент ці дослідження не мають прямих аналогів. 4. Вперше розроблено високоселективний метод каталітичного борилювання за третинними зв'язками C-H для синтезу борзаміщених біцикло[1.1.1]пентанів і (гетеро)біцикло[2.1.1]гексанів, які є біоізостерами пара-заміщених бензенів.

Реферат англійською:

An effective preparative method for the purposeful synthesis of fluorine-containing pyrazoles has been developed. Silver-ethylene complexes are of particular interest because silver is used for the partial oxidation of ethylene, which is a major industrial process. They are difficult to stabilize and are quite labile due to the relatively weak silver(I)–ethylene bond. The use of new fluorine-containing pyrazoles created by us as ligands in coordination chemistry made it possible for the first time to stabilize an unusual trinuclear silver-ethylene complex in the crystalline state, as well as to obtain two unprecedented binuclear silver-ethylene complexes with bridged pyrazolates. 2. A preparative metal-free two-stage method for the synthesis of trisubstituted CF3-cyclopropanes, interesting for the search for new drugs, was created. The main disadvantages of the known methods are the involvement of strong organic or mineral bases, which impose restrictions on the volume of the reaction, low atomic economy, and the use of expensive metal catalysts. The synthesis method created by us does not have these limitations and is limited only by the reactivity of the starting alkene, has a high tolerance for various functional groups and scalability. 3. Previously, we showed for the first time that the corresponding substituted derivatives of 2-azaspiro[3.3]heptane are bioisosteres of piperidine: replacement of the piperidine moiety in the local anesthetic bupivacaine with 2-azaspiro[3.3]heptane-1-carboxylic acid led to increased activity of the analog with a longer duration action, and replacement with 7-oxa-2-azaspiro[3.5]nonane-1-carboxylic acid led to a decrease in toxicity and an increase in water solubility while maintaining activity comparable to the original.

Continuing our research, we expanded the range of objects, at the moment these studies have no direct analogues.

Індекс УДК: 547.9;577.1

Коди тематичних рубрик: 31.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Войтенко Зоя Всеволодівна

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Ефективний препаративний метод синтезу

Назва НТП англійською: Effective preparative method

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено ефективний препаративний метод синтезу цілеспрямованого синтезу флуоровмісних піразолів. Срібно-етиленові комплекси представляють особливий інтерес, оскільки срібло використовується для часткового окислення етилену, який є основним промисловим процесом. Їх важко стабілізувати та вони досить лабільні через відносно слабкий зв'язок срібло(I)–етилен. Використання створених нами нових флуоровмісних піразолів як лігандів у координаційній хімії дало змогу вперше стабілізувати незвичайний триядерний срібно-етиленовий комплекс у кристалічному стані, а також одержати два безпрецедентних двоядерних срібно-етиленових комплекса з містковими піразолатами. 2. Створено препаративний безметалевий двостадійний метод синтезу тризаміщених CF3-циклопропанів, цікавих для пошуку нових лікарських засобів. Основні недоліки відомих методів – це залучення сильних органічних або мінеральних основ, які накладають обмеження на обсяг реакції, низька атомна економія і використання дорогих металевих каталізаторів. Створений нами метод синтезу не має цих обмежень і обмежений лише реакційною здатністю вихідного алкену, має високу толерантність до різних функціональних груп та масштабованість. 3. Раніше ми вперше показали, що відповідні заміщені похідні 2-азаспіро[3.3]гептану є біоізостерами піперидину: заміна піперидинового фрагменту у місцевому анестетику бупівакаїну на 2-азаспіро[3.3]гептан-1-карбонову кислоту привело до посилення активності аналогу з більшою тривалістю дії, а заміна на 7-окса-2-азаспіро[3.5]нонан-1-карбонову кислоту привело до зменшення токсичності та збільшенню розчинності у воді при збереженні активності, співставної з оригіналом. Продовжуючи наші дослідження, ми розширили коло об'єктів, на даний момент ці дослідження не мають прямих аналогів.

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:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Статті у журналах, що індексуються наукометричними базами даних - 4; грантових угод - 1; подано заявок на державні, міжнародні наукові гранти - 1

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Толстанова Ганна Миколаївна
д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Єгорова Тетяна Володимирівна
(к. х. н.)

Киричок Олександр Олександрович

Кисіль Андрій Іванович
(к. х. н.)

Левков Ігор Вікторович
(к. х. н.)

Любчук Тетяна Володимирівна

Михайлюк Павло Костянтинович
(д. х. н., 02.00.03)

Шилін Сергій Володимирович
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Бурих А.А.

Телефон +38 (044) 239-31-88

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

