

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U102160

Державний реєстраційний номер: 0116U008795

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-12-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Гетерокаталітичне гідрування - ефективний підхід до біологічно важливих насичених азотовмісних сполук з практично корисними властивостями

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут органічної хімії
НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул.Мурманська,5, м. Київ, Київська обл., 02660, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444994613

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, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 3930

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Гетерокаталітичне гідрування - ефективний підхід до біологічно важливих насичених азотовмісних сполук з практично корисними властивостями

Назва роботи англійською:

Heterocatalytic hydrogenation - an effective approach to biologically important saturated nitrogen-containing compounds with practically useful properties

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - функціоналізовані гетероциклічні сполуки (піроли, конденсовані азотовмісні цикли) та макрогетеро(карбо)циклічні сполуки, гомо- та гетерогенні каталізатори гідрування. Мета роботи: реалізація технологічно ефективного, екологічно безпечного та економічно дешевого способу одержання функціоналізованих гетероциклічних (піролідини, піперидини) та макрогетеро(карбо)циклічних сполук, який ґрунтується на використанні технології каталітичного гідрування відповідних доступних субстратів. Методи дослідження - органічний синтез, елементний аналіз, спектральні методи (ІЧ, ЯМР спектроскопія, мас- та хроматомас-спектрометрія), рентгеноструктурний аналіз. Розроблено ефективний метод гідрування заміщених пірол-3-карбоксилатів у присутності 10% Pd/C-каталізатора. Встановлено, що перебіг реакції відновлення пірольного циклу при 40°C впродовж 20 год супроводжується повною конверсією вихідних сполук, відзначається високою стереоселективністю і приводить до діастереомерної суміші N-Вос- захищених піролідин-3-карбоксилатів: продуктів цис-конфігурації та транс-конфігурації, вміст яких за даними ЯМР ¹H спектрів та хроматомас-спектрів складає 84-87% та 13-16% відповідно. Розроблено зручні та препаративні методи каталітичного гідрування хінолінів, які дозволяють отримувати тетрагідрохіноліни, не використовуючи спеціальні методи очистки.

Реферат англійською:

Object of study - functionalized heterocyclic compounds (pyrrole, condensed nitrogen cycles) and macrohetero (carbo) cyclic compounds, homo- and heterogeneous hydrogenation catalysts. Objective: implementation of a technologically efficient, environmentally sound and economically cheap method of making functionalized heterocyclic (pyrrolidine, piperidine) and macrohetero (carbo) cyclic compounds, based on the use of appropriate technology catalytic hydrogenation of available substrates. Research methods - organic synthesis, elemental analysis, spectral methods (IR, NMR spectroscopy, mass spectrometry and chromatography), X-ray analysis. An efficient method of hydrogenation of substituted pyrrole-3-carboxylates in the presence of 10% Pd / C catalyst was developed. It is established that the course of the reaction of the hydrogenation of the pyrrole cycle at 40 ° C for 20 h is accompanied by a complete conversion of the starting compounds, is characterized by high stereoselectivity and leads to a diastereomeric mixture of N-Boc-protected pyrrolidine-3-carboxylates, which ¹H NMR spectra and chromatomas spectra were 84-87% and 13-16%, respectively. Convenient and preparative methods of catalytic hydrogenation of quinolines have been developed, which allow to obtain tetrahydroquinolines without using special purification methods.

Індекс УДК: 547, 547.241.76.597

Коди тематичних рубрик: 31.21.01

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Юрченко Олександр Олексійович

Науковий ступінь: к. х. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: ефективні методи синтезу нових речовин з корисними властивостями

Назва НТП англійською: effective methods for the synthesis of new substances with useful properties

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: 72.19. Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Систематизовано методи одержання п-пролінів та їх естерів, які базуються як на внутрішньо- та міжмолекулярних реакціях формування функціоналізованого піролідинового циклу, так і на каталітичному відновленні відповідних 2,3-дизаміщених піролів та їх дигідропохідних. Обґрунтована необхідність вдосконалення процесу гідрування 2,3-дизаміщених піролів із використанням дешевих каталізаторів. Запропоновано підхід до одержання п-заміщених-п-пролінів, першою стадією якого є N-Вос-захист 2-заміщених пірол-3-карбоксилатів ди(трет-бутил)дикарбонатом (Вос-ангідридом) в розчині дихлорометану при кімнатній температурі в присутності каталітичної кількості N,N-диметиламінопіридину. Проведено гідрування заміщених пірол-3-карбоксилатів в автоклаві при 45 атм при 40 оС впродовж 20 год у присутності 10% Pd/C-каталізатора. Встановлено, що перебіг такої реакції при 40оС впродовж 20 год супроводжується повною конверсією вихідних сполук, відзначається високою стереоселективністю і приводить до діастереомерної суміші N-Вос-захисених піролідин-3-карбоксилатів: продуктів цис-конфігурації та транс-конфігурації, вміст яких за даними ЯМР ¹H спектрів та хроматомас-спектрів складає 84-87% та 13-16% відповідно. М'який гідроліз виділених реакційних сумішей гідроксидом літію у водному середовищі та подальша нейтралізація і зняття N-Вос-захисту за допомогою 15%-вої хлоридної кислоти дозволила в аналітично чистому вигляді виділити із виходами 69-74% мажорні продукти – п-заміщені п-проліни. Їх цис-конфігурація і відповідно така ж геометрія карбоксилатів, надійно встановлена на прикладі сполуки V 6 ЯМР ¹H спектрами із використанням експерименту NOESI. Розроблено зручні та препаративні методи каталітичного гідрування хінолінів, які дозволяють отримувати тетрагідрохіноліни, не використовуючи спеціальні методи очистки.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції: науково-промислове об'єднання "Укроргсинтез"

Перспективні ринки: хімфарм підприємства

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 1000

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

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 10000

Очікуваний термін окупності (років): 10

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

[1] Кемський С.В. Pd/C-каталізоване гідрування метил пірол-3-карбоксилатів в діастереоселективному синтезі п-заміщених п-пролінів[текст] / О.О. Юрченко, А.М. Грозав, М.В. Вовк // Укр.хім.журн.(друк). [2] Rodik R. Functional Calixarenes for Material and Life Science [Text]/ S.Cherenok, O.Kalchenko, O.Yesypenko, J.Lipkowski, V. Kalchenko // Current Organic Chemistry. – 2018. – Vol. 22. – P. 2196-2218. [3] Cherenok S.O. Methylsulfidopropoxycalixarene methylenebisphosphonic acid for aminoacids c

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кальченко Віталій Іванович

д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Вовк Михайло Володимирович

(д. х. н., 02.00.03)

Кемський Сергій Володимирович

Чайковська О. О.

Черенок Сергій Олексійович

(к.х.н., 02.00.03)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Чайковська Олександра Олексіївна

Телефон

+38 (067) 321-13-48

Реєстратор

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

