

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005820

Державний реєстраційний номер: 0120U100309

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Розробка методів синтезу аналогів ауруну та ізофлавоноїдів з фармакоформними азагетеро-циклічними замісниками з метою одержання нових біологічно активних речовин.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445599800, 380445585388

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, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 7692.739

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Спрямований синтез нових нітроген- та оксигенвмісних гетероциклічних сполук як низькомолекулярних біорегуляторів

Назва роботи англійською:

Directed synthesis of novel nitrogen- and oxygencontaining heterocyclic compounds as low molecular weight bioregulators.

Реферат українською:

Розроблено ефективні методи синтезу піразоловмісних ауронів. Реакція бензофуран-3(2H)-онів з 1H-піразол-3(5)/4-карбоксальдегідами або 4-[(диметиламіно)-метиле́н]-2,4-дигідро-3H-піразол-3-онами протікає з утворенням 2-піразолілметиле́н-1-бензофуран-3(2H)-онів або 2-[(3(5)-гідрокси-1H-піразол-4-іл)метиле́н]-1-бензофуран-3(2H)-онів відповідно. Реакція 2-[(диметиламіно)метиле́н]-1-бензофуран-3(2H)-онів з 1-метил-5-амінопіразолами привела до утворення 2-[(5-аміно-1-метил-1H-піразол-4)-іл)метиле́н]-1-бензофуран-3(2H)-онів та 1-метил-1H-[1]бензофуро[3,2-b]піразоло[4,3-e]піридинів як міnorних продуктів. Розроблено простий метод синтезу п-(3(5)-трифторметилпіразол-5(3)-іл)-2-гідроксидезоксибензоїнів хемоселективною реакцією 2-(1,1,1-трифторацетоніл)хромонів з дигідрохлоридом гідразину. Цей підхід включає в себе початкову атаку гідразину по карбонільному атому групи CF₃C(O)CH₂ з наступним розкриттям хромонового кільця по атому C-2 і подальшу циклізацію до піразолів. Така синтетична стратегія забезпечує легкий доступ до нового типу фармацевтично привабливих гібридів 3-(трифторметил)піразол-дезоксibenzoїну з високими виходами.

Реферат англійською:

Effective methods for the synthesis of pyrazole-containing aurones have been developed. The reaction of benzofuran-3(2H)-ones with 1H-pyrazol-3(5)/4-carboxaldehydes or 4-[(dimethylamino)-methylene]-2,4-dihydro-3H-pyrazol-3-ones proceeds with the formation of 2-pyrazolylmethylene-1-benzofuran-3(2H)-ones or 2-[(3(5)-hydroxy-1H-pyrazol-4-yl)-methylene]-1-benzofuran-3(2H)-ones, respectively. The reaction of 2-[(dimethylamino)-methylene]-1-benzofuran-3(2H)-ones with 1-methyl-5-aminopyrazoles led to the formation of 2-[(5-amino-1-methyl-1H-pyrazol-4)-yl)methylene]-1-benzofuran-3(2H)-ones and 1-methyl-1H-[1]benzofuro[3,2-b]pyrazolo[4,3-e]pyridines as minor products. A simple method for the synthesis of п-(3(5)-trifluoromethylpyrazol-5(3)-yl)-2-hydroxydeoxybenzoins by chemoselective reaction of 2-(1,1,1-trifluoroacetyl)chromones with hydrazine dihydrochloride was developed. This approach includes the initial attack of hydrazine on the carbonyl atom of the CF₃C(O)CH₂ group followed by opening of the chromone ring on the C-2 atom and subsequent cyclization to pyrazoles. Such a synthetic strategy provides easy access to a new type of pharmaceutically attractive 3-(trifluoromethyl)pyrazole-deoxybenzoin hybrids in high yields.

Індекс УДК: 547.595, 547.64, 547.73, 547.8, 577.112;577.122;547.466;547.96, 577.127;547.973

Коди тематичних рубрик: 31.21.21.15, 31.21.25.09, 31.21.27.05, 31.21.27.07, 31.23.27, 31.23.39

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Броварець Володимир Сергійович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Біологічно спрямована розробка зручних підходів до синтезу піразоловмісних ауронів та ізофлавоноїдів з фармакофорними азагетероциклічними замісниками.

Назва НТП англійською: Biologically oriented development of convenient approaches to the synthesis of pyrazole-containing aurones and isoflavonoids with pharmacophoric azaheterocyclic substituents.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Установи НАН України та освіти, Охорона здоров'я, сільське господарство.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розробка нових підходів до синтезу природних сполук та їх модифікація є перспективною стратегією пошуку нових ефективних лікарських засобів. Флавоноїди представляють клас природних сполук, що проявляють широкий спектр біологічної активності та досліджуються як перспективні скафолди для дизайну лікарських препаратів. Біологічна активність природних флавоноїдів та їх синтетичних аналогів включає антиоксидантну, антимікробну, протівірусну та протипухлинну. Аурони є мінорним класом флавоноїдних сполук. Незважаючи на те, що аурони складають невелику групу вторинних метаболітів, вони демонструють високий потенціал для терапії багатьох захворювань. Тому розробка методів синтезу невідомих раніше аналогів аурону та ізофлавоноїдів з фармакофорними азагетероциклічними замісниками є важливою як з теоретичної, так і з практичної точки зору.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: Установи НАН України та освіти, Міністерство охорони здоров'я, Міністерство аграрної політики та продовольства.

Перспективні ринки: Україна

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

1. Myshko N. V., Mrug G. P., Kondratyuk K. M., Bondarenko S. P., Frasinyuk M. S. Coumarin-based homoisoflavonoids as precursors in the synthesis of 8-heteroarylmethylcoumarins. *Chem. Heterocycl. Compd.* 2023. Vol. 59, N 6/7. P. 456–464. <https://doi.org/10.1007/s10593-023-03216-9>
2. Chernykh A. V., Kudryk O. V., Olifir O. S., Dobrydnev A. V., Rusanov E., Moskvina V. S., Volochnyuk D. M., Grygorenko O. O. Expanding the chemical space of 1,2-difunctionalized cyclobutanes. *J. Org. Chem.* 2023. Vol. 88, N 5. P. 3109–3131. <https://doi.org/10.1021/acs.joc.2c02892>
3. Dibchak D., Snisarenko M., Mishuk A., Shablykin O., Bortnichuk L., Klymenko-Ulianov O., Kheylik Yu., Sadkova I., Rzepa H. S., Mykhailiuk P. K. General synthesis of 3-azabicyclo [3.1.1]heptanes and evaluation of their properties as saturated isosteres. *Angewandte Chemie.* 2023. Vol. 135, N 39. e202304246. <https://doi.org/10.1002/ange.202304246>
4. Shablykin O. V., Brovarets V. S., Shablykina O. V. Recyclization of 5-aminooxazoles as a route to new functionalized heterocycles (developments of V.P. Kukhar institute of bioorganic chemistry and petrochemistry of the NAS of Ukraine). *Chem. Record.* 2023. e202300264. <https://doi.org/10.1002/tcr.202300264>
5. Malets Ye. S., Golovchenko O. V. 2,2-Disubstituted 5- and 8-azachroman-4-ones: the effect on cancer growth in contrast to chromanone analogs. *UBA.* 2023. Vol. 18, N 1. P. 22–26.
6. Malets Ye. S., Vashchenko B. V., Moskvina V. S., Golovchenko O. V., Brovarets V. S., Grygorenko O. O. Parent 5(7)-azachromones and their partially hydrogenated derivatives: synthesis and physiochemical properties. *Chem. Heterocycl. Comp.* 2023. Vol. 59, N 6/7. P. 494–499.
7. Tsygankova V. A., Andreev A., Andrusevich Ya. V., Pilyo S. G., Brovarets V. S. Effect of plant growth regulators and fertilizers of the vegetative growth of sunflowers (*Helianthus annuus* L). *Int. J. Heritage Stud.* 2023. N 116. P. 3–9. <https://doi.org/10.5281/zenodo.8129039>.
8. Los O. V., Sinenko V. O., Kobzar O. L., Zhirnov V. V., Vovk A. I., Brovarets V. S. Synthesis and in vitro anticancer potential of new thiazole-containing derivatives of rhodanine. *Chem. Het. Compd.* 2023. Vol. 59, N 6/7. P. 484–493.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

д. х. н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Іванова Ірина Володимирівна

(к.х.н., 02.00.10)

Багреева Оксана Сергіївна

Бодачівський Юрій Станіславович

(к. х. н., 02.00.13)

Бруснаков Михайло Юрійович

Велігіна Євгенія Сергіївна

(к.х.н., 02.00.10)

Виджак Роман Миколайович

(к.х.н., 02.00.03)

Герасимов Єгор Сергійович

Головченко Олександр Володимирович

(к. х. н., 02.00.10)

Демидчук Богдан Андрійович

(к.х.н., 02.00.03)

Жирнов Віктор Валентинович

(д. мед. н., 14.03.06)

Зябрев Володимир Стефанович

(к.х.н., 02.00.03)

Качаєва Марина Володимирівна

(02.00.10)

Качковський Олексій Дмитрович

(д. х. н., 02.00.03)

Ключко Світлана Вікторівна

(к.х.н., 02.00.10)

Козаченко Олександр Павлович

(к.х.н., 02.00.10)

Кондратюк Костянтин Михайлович

(к.х.н., 02.00.10)

Коноваленко Артем Сергійович

Лось Олександр Валентинович

Лютенко Наталія Василівна

(к.х.н.)

Малець Єгор Сергійович

Мержієвський Данило Олександрович

Москвіна Вікторія Сергіївна

(к. х. н., 02.00.03)

Мруг Галина Петрівна

(к.х.н., 02.00.10)

Мітюхін Олег Петрович

(к.х.н., 02.00.06)

Панчишин Світлана Ярославівна

(к.х.н., 02.00.03)

Порхун Світлана Василівна

Потіха Людмила Михайлівна

(д. х. н.)

Прокопенко Володимир Михайлович

(к.х.н., 02.00.10)

Простота Ярослав Олександрович

(к.х.н., 02.00.03)

Пільо Степан Григорович

(к.х.н., 02.00.03)

Ренцевич Тетяна Леонідівна

Северін Олександр Олегович

Синенко Віталій Олегович

(к. х. н., 02.00.10)

Сливчук Сергій Ростиславович

(к.х.н., 02.00.10)

Соломянний Роман Миколайович

(02.00.10)

Фрасинюк Михайло Сергійович

(к. х. н., 02.00.03)

Чумаченко Світлана Анатоліївна

(к.х.н., 02.00.10)

Шабликін Олег Валентинович

(к.х.н., 02.00.10)

Шабликіна Ольга Валентинівна

(к. х. н., 02.00.03)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Бондаренко О.М.

Телефон

+38 (044) 573-27-01

Реєстратор

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

