Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005815

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Розробка методів одержання сполук з каркасними будівельними блоками, що містять загальні фармакофорні фрагменти циклобутану та гетеробіцикло[2.1.1]гексану

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної 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: 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка нових підходів до синтезу флуоровмісних поліфункціоналізованих природних сполук та їх структурних аналогів

Назва роботи англійською:

Development of new approaches to the synthesis of fluorine-containing polyfunctionalized natural compounds and their structural analogues

Реферат українською:

Метою роботи є дизайн та розробка методів синтезу нових 1,3-заміщених ди-/три-флуорометильованих циклобутанів, як перспективних білдинг блоків. Практичне значення одержаних результатів полягає в розробці практичного методу отримання нових 1,3-заміщених ди-/три-флуорометильованих циклобутанів, перспективних білдинг блоків для синтезу фторованих потенційно біологічно активних сполук.Нами узагальнено та систематизовано літературні дані щодо синтезу фторованих аналогів біологічно активних сполук. Розроблено новий загальний та простий спосіб одержання 1,3-заміщених ди-/три-флуорометильованих циклобутанів, які є перспективними вихідними сполуками для синтезу флуорованих потенційно біологічно активних сполук.

Реферат англійською:

The aim of the work is the design and development of methods for the synthesis of new 1,3-substituted di-/tri-fluoromethylated cyclobutanes as promising building blocks. The practical significance of the obtained results lies in the development of a practical method of obtaining new 1,3-substituted di-/tri-fluoromethylated cyclobutanes, promising building blocks for the synthesis of fluorinated potentially biologically active compounds. We summarized and systematized literature data on the synthesis of fluorinated analogs of biologically active compounds. A new general and simple method for obtaining 1,3-substituted di-/tri-fluoromethylated cyclobutanes, which are promising starting compounds for the synthesis of fluorinated potentially biologically active compounds, has been developed.

Індекс УДК: 547.9;577.1

Коди тематичних рубрик: 31.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Герус Ігор Іванович

Науковий ступінь:

Наукове звання:

Ідентифікатор ORCHID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Наукові публікації та методики синтезів нових 1,3-заміщених ди-/три-флуорометильованих циклобутанів, потенційних вихідних сполук для отримання біологічно активних сполук.

Назва НТП англійською: Scientific publications and methods of syntheses of new 1,3-substituted di-/tri-fluoromethylated cyclobutanes, potential starting compounds for obtaining biologically active compounds.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження та розробки в галузі природничих та технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Узагальнено та систематизовано літературні дані щодо синтезу фторованих аналогів біологічно активних сполук. Розроблено новий загальний та простий спосіб одержання 1,3-заміщених ди-/три-флуорометильованих циклобутанів, які є перспективними вихідними сполуками для синтезу флуорованих потенційно біологічно активних сполук.

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: Науково-дослідні установи

Перспективні ринки: Україна, зарубіжні науково-дослідни установи та компанії з медичної хімії

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

1. E. Shaitanova, V. Matoušek, T. Herentin, M. Adamec, R. Matyáš, B. Klepetářová, P. Beier. Synthesis and Cycloaddition Reactions of 1-Azido-1,1,2,2-tetrafluoroethane. J. Org. Chem. 2023, 88, (21), P. 14969–14977. https://doi.org/10.1021/acs.joc.3c01346.

2. D. Hodyna, V. Kovalishyn, M. Kachaeva, Y. Shulha, A. Klipkov, E. Shaitanova, O. Kobzar, O. Shablykin, L. Metelytsia. In Silico, In Vitro and In Vivo Study of Substituted Imidazolidinone Sulfonamides as Antibacterial Agents. Chemistry & Biodiversity, 2023, e202301267. https://doi.org/10.1002/cbdv.202301267

3. J. He, Z. Li, G. Dhawan, W. Zhang, A. E. Sorochinsky, G. Butler, V. A. Soloshonok, J. Han. Fluorine-containing drugs approved by the FDA in 2021[J]. Chinese Chemical Letters, 2023, 34(1), 107578. doi: 10.1016/j.cclet.2022.06.001

4. N. V. Lyutenko, A. E. Sorochinsky, V. A. Soloshonok. Asymmetric synthesis of pyroglutamic acids via Ni(II)-complex methodology. Chemistry of Heterocyclic Compounds, 2023, 59, 332–340. https://link.springer.com/article/10.1007/s10593-023-03203-0

5. N. V. Lyutenko, A. E. Sorochinsky, V. A. Soloshonok. Applications of chiral sulfinyl auxiliaries in the asymmetric synthesis of fluorinated amines and amino acids. Ukrainica Bioorganica Acta, 2023, 18, 10-21. https://doi.org/10.15407/bioorganica2023.01.010

6. V.D. Romanenko. Synthetic strategies toward and around the CF3S(O) structural motif. Current Organic Chemistry, 2023, .27, 411-434. DOI:10.2174/1385272827666230517114921.

7. A. A. Klipkov, I. I. Gerus. Electrophilic reactions of 7-(trifluoromethyl)-2,3-dihydro-1H-pyrrolizine – the way towards new building blocks. J. Org. Pharm. Chem. 2023, 21 (2), 36-40. https://doi.org/10.24959/ophcj.23.284640

8. S. Holovach, K. P. Melnykov, I. Poroshyn, R. T. Iminov, D. Dudenko, I. S. Kondratov, M. Levin, O. O. Grygorenko. C–C Coupling through Nitrogen Deletion: Application to Library Synthesis. Chemistry A European Journal, 2023, 29 (4), e202203470. https://doi.org/10.1002/chem.202203470

9. I. Logvinenko, V. Dolovanyuk, I. Kondratov. Multigram synthesis of 2-(trifluoromethoxy)ethan-1-ol and 3-(trifluoromethoxy)propan-1-ol – perspective Building Blocks for Drug Discovery. Ukrainica Bioorganica Acta, 2023, 18 (1), 27-31. https://doi.org/10.15407/bioorganica2023.01.027

10. E.A.Fink,C.Bardine,S.Gahbauer,I.Singh,T.C.Detomasi,K.White,S.Gu,X.Wan,J.Chen,B.Ary,I.Glenn,J.O'Connell,H.O'Donnell,P.Fa J.Lyu, S.Vigneron,N.J.Young, I.Kondratov, A.Alisoltani, L.M. Simons, R.Lorenzo-Redondo, E.A.Ozer, J.F.Hultquist, A.J.O'Donoghue, Y.S.Moroz, J.Taunton, A.R.Renslo, J.J.Irwin, A.García-Sastre, B.K.Shoichet, C.S.Craik. Large library docking for novel SARSCoV2 main protease noncovalent and covalent inhibitors. Protein Science,2023,32,e4712.https://doi.org/10.1002/pro.4712

11. S. Gahbauer, C. DeLeon, J. M. Braz, V. Craik, H.J. Kang, X. Wan, X.-P. Huang, C. B. Billesbølle, Y. Liu, T. Che, I. Deshpande, M. Jewell, E. A. Fink, I. S. Kondratov, Y. S. Moroz, J. J. Irwin, A. I. Basbaum, B. L. Roth, B. K. Shoichet. Docking for EP4R antagonists active against inflammatory pain. Nature Communications, 2023, 14, (1), 8067. https://doi.org/10.1038/s41467-023-43506-6

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Вовк Андрій Іванович

Перелік осіб-виконавців

Агунович Володимир Андрійович

Вдовенко Сергій Іванович

Долованюк Віолетта Геннадіївна

Кліпков Антон Анатолійович

Кулик Ірина Броніславівна

Логвиненко Іван Геннадійович

Рибакова Антоніна Вікторівна

Романенко Владислав Демидович

Ручко Євгенія Володимирівна

Тарасенко Карен Володимирович

Федоренко Олена Андріївна

Феськов Ілля Олександрович

Хільчевський Олександр Миколайович

Шайтанова Олена Миколаївна

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