Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U104306

Державний реєстраційний номер: 0119U100320

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-03-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дослідження реакцій циклоприєднання в каталітичних умовах.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

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, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442393141

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: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 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.): 1807.700

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Селективність у реакціях карбо-, гетероциклізації і функціоналізації для медичної хімії та сталого розвитку.

Назва роботи англійською:

Selectivity in the reactions of carbo-, heterocyclic and functionalization for medical chemistry and sustainable development.

Реферат українською:

Об’єкт дослідження: гетероциклічні сполуки, в т.ч. нітрогеновмісні (ізоіндоли, конденсовані ізоіндоли, їх гетероаналоги, хіназолони, їх гетероаналоги, піридиновмісні амінокислоти, малеїн- і сукциніміди тощо) та оксигеновмісні (хромони та їх похідні, конденсовані оксигеновмісні системи з одним або двома гетероатомами тощо). Мета роботи: розробка сучасних селективних і препаративних синтетичних підходів до одержання нових молекул карбо- та гетероциклічної природи, а також їх подальша керована функціоналізація для медичної хімії та сталого розвитку. Методи дослідження: вивчення спектральними та комп'ютерними методами впливу різноманітних чинників, що визначають селективність досліджуваних реакцій карбо-, гетероциклізації та функціоналізації (каталізатор, розчинник, температура, електронна природа замісників, стеричні фактори тощо), дослідження спектрів флуоресценції. Встановлено вплив каталітичних умов та асиметричної індукції на перебіг реакції циклоприєднання. Досліджено реакцію циклізації аміноіміноізоіндолу з заміщеними орто-амінобензоатними кислотами, а також їх гетероаналогами. Вивчено особливості будови та фізико-хімічних властивостей одержаних сполук. Проведено модифікацію похідних хроманону, досліджено будови і властивості продуктів реакцій. Розроблено селективний препаративний метод синтезу оксадіазолів хроманонового ряду. Модифіковано синтетичні аналоги природних сполук залишками амінокислот. Синтезовано флуоресцентні зонди – похідні 3-гідроксифлавону, що здатні утворювати збільшену, у порівнянні з відомими аналогами, кількість водневих зв’язків, стекінг-взаємодій та дипольдипольних взаємодій, зокрема модифіковані у 4' положенні амінофлавоноли: 2[4-[біс(2-гідроксиетил)аміно]феніл]-3-гідрокси-4Н-1-бензопіран-4-он, 2-(4(біс(2-азидоетил)аміно)феніл)-3-гідрокси-4Н-хромен-4-он, 3-(4-(біс(2гідроксиетил)-аміно)феніл)-2-гідрокси-1Н-бензо[f]хромен-1-он, 3-(4-(біс(2азидоетил)аміно)-феніл)-2-гідрокси-1Н-бензо[f]хромен-1-он.

Реферат англійською:

Object of research: heterocyclic compounds, incl. nitrogen-containing (isoindoles, condensed isoindoles, their heteroanalogues, quinazolones, their heteroanalogues, pyridine-containing amino acids, maleic and succinimides, etc.) and oxygen-containing (chromones and their derivatives, condensed oxygen-containing systems, etc.) with one or two. Purpose: development of modern selective and preparative synthetic approaches to obtaining new molecules of carbo- and heterocyclic nature, as well as their further controlled functionalization for medical chemistry and sustainable development. Research methods: study by spectral and computer methods of influence of various factors that determine the selectivity of the studied reactions of carbo-, heterocyclization and functionalization (catalyst, solvent, temperature, electronic nature of substituents, steric factors, etc.), study of fluorescence spectra. The influence of catalytic conditions and asymmetric induction on the course of the cycloaddition reaction is established. The cyclization reaction of aminoiminoisoindole with substituted ortho-aminobenzoic acids, as well as their heteroanalogues, has been studied. The peculiarities of the structure and physicochemical properties of the obtained compounds are studied. Modification of chromanone derivatives is carried out, structures and properties of reaction products are investigated. A selective preparative method for the synthesis of oxadiazoles of the chromanon series has been developed. Synthetic analogues of natural compounds with amino acid residues have been modified. Fluorescent probes were synthesized - derivatives of 3-hydroxyflavone, which are able to form an increased, compared to known analogues, the number of hydrogen

bonds, stacking interactions and dipoldipole interactions, in particular modified in the 4 'position aminoflavonols:

Індекс УДК: 547:544.18;547:544.16;547:544.12, 547:544.424, 547:544.42/.43, 547.595, 547.7/.8

Коди тематичних рубрик: 31.21.15, 31.21.17, 31.21.18, 31.21.21.15, 31.21.27

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: Сучасні селективні і препаративні синтетичні підходи

Назва НТП англійською: Modern selective and preparative synthetic approaches

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Нові селективні реакції

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та разробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Встановлено вплив каталітичних умов та асиметричної індукції на перебіг реакції циклоприєднання. Досліджено реакцію циклізації аміноіміноізоіндолу з заміщеними орто-амінобензоатними кислотами, а також їх гетероаналогами. Вивчено особливості будови та фізико-хімічних властивостей одержаних сполук. Проведено модифікацію похідних хроманону, досліджено будови і властивості продуктів реакцій. Розроблено селективний препаративний метод синтезу оксадіазолів хроманонового ряду. Модифіковано синтетичні аналоги природних сполук залишками амінокислот. Синтезовано флуоресцентні зонди – похідні 3-гідроксифлавону, що здатні утворювати збільшену, у порівнянні з відомими аналогами, кількість водневих зв'язків, стекінг-взаємодій та дипольдипольних взаємодій, зокрема модифіковані у 4' положенні амінофлавоноли: 2[4-[біс(2-гідроксиетил)аміно]феніл]-3-гідрокси-4H-1-бензопіран-4-он, 2-(4(біс(2-азидоетил)аміно)феніл)-3-гідрокси-4H-хромен-4-он, 3-(4-(біс(2гідроксиетил)-аміно)феніл)-2-гідрокси-1H-бензо[f]хромен-1-он, 3-(4-(біс(2азидоетил)аміно)-феніл)-2-гідрокси-1H-бензо[f]хромен-1-он. Вивчено взаємодію даних сполук з АТФ та селективність цієї взаємодії.

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 входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 15; публікації в матеріалах конференцій, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 1; статті у журналах, що включені до переліку наукових фахових видань України - 2;

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Жилінська Оксана Іванівна
д. е. н., 08.00.03

Перелік осіб-виконавців

Єгорова Тетяна Володимирівна
(к.х.н., 02.00.03)

Івон Євген Миколайович

Бугера Олександра Ігорівна
(к. х. н.)

Бійцева Ангеліна Володимирівна
(к. х. н.)

Кисіль Андрій Іванович
(к. х. н.)

Крикун Сергій Олександрович
(к. х. н.)

Левков Ігор Вікторович
(к. х. н.)

Любчук Тетяна Володимирівна

Цапко Магдаліна Дмитрівна

Шилін Сергій Володимирович
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Катасонова В.В.

Телефон +38 (044) 239-31-88

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

