# Облікова картка ДіР

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0223U000271

**Державний реєстраційний номер:** 0122U000443

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 05-01-2023

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 1

**Назва етапу:** Синтез поліфлуороалкілвмісних піролів як будівельних блоків для отримання флуоровмісних алкалоїдів піролідинового ряду

**Початок етапу:** 01.2022

**Закінчення етапу:** 12.2022

**Вид звітного 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. Мурманська, 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)

**Напрям фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

#### 7713 - кошти держбюджету

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 6541030

**Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):** 3687.104

## 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 поліфтороалкілвмісних білдинг блоків, на основі яких будуть розроблені методи синтезу нових біоактивних сполук таких, як фторовмісні алкалоїди піролідинового ряду. Практичне значення одержаних результатів полягає в розробці практичного методу отримання поліфтороалкілпіролів, ефективних підходів щодо синтезу фторованих аналогів алкалоїдів піролідинового ряду, потенційно біологічно активних сполук гетероциклічної природи з використанням нових низькомолекулярних функціоналізованих будівельних блоків. Нами узагальнено та систематизовано літературні дані щодо синтезу фторованих аналогів алкалоїдів ряду піролізидину, індолізидину та хінолізидину тощо. Розроблено новий загальний та простий спосіб одержання поліфтороалкілпіролів, які є перспективними вихідними сполуками для синтезу флуорованих похідних алкалоїдів ряду піролізидину. Досліджено реакцію циклоутворення поліфтороалкілпіролів з N-(□-трифтороацетил)вініл (TFAV) похідних проліну та інших □-амінокислот.

### Реферат англійською:

The aim of the work is the design and development of methods for the synthesis of new polyfluoroalkyl-containing building blocks, on the basis of which the methods of synthesis of new bioactive compounds such as fluorine-containing alkaloids of the pyrrolidine series will be developed. The practical significance of the obtained results lies in the development of a practical method for obtaining polyfluoroalkylpyrroles, effective approaches to the synthesis of fluorinated analogs of pyrrolidine alkaloids, potentially biologically active compounds of a heterocyclic nature using new low molecular weight functionalized building blocks. We summarized and systematized literature data on the synthesis of fluorinated analogs of pyrrolizidine, indolizidine and quinolizidine alkaloids, etc. A new general and simple method of obtaining polyfluoroalkylpyrroles, which are promising starting compounds for the synthesis of fluorinated alkaloid derivatives of the pyrrolizidine series, has been developed. The cyclization formation of polyfluoroalkylpyrroles from N-(□-trifluoroacetyl)vinyl (TFAV) derivatives of proline and other □-amino acids was studied.

**Індекс УДК:** 547.9;577.1

**Коди тематичних рубрик:** 31.23

### Керівники роботи

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

**Науковий ступінь:** д.х.н.

**Вчене звання:** с.н.с.

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Наукові публікації та методики синтезів нових поліфтороалкілвмісних піролів, потенційних вихідних сполук для отримання біологічно активних гетероциклів.

**Назва НТП англійською:** Scientific publications and methods of syntheses of new polyfluoroalkyl-containing pyrroles, potential starting compounds for obtaining biologically active heterocycles.

**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 алкалоїдів ряду піролізидину, індолізидину та хінолізидину тощо. Запропоновано зручний метод синтезу нових поліфтороалкілвмісних піролів, що будуть використані у синтезі потенційно біологічно активних гетероциклів: піролізидину, індолізидину тощо.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** 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:** 01.2022
- **Закінчення етапу:** 12.2022

**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. S.I. Vdovenko, I.I. Gerus, M. Pagacz-Kostrzewa, M. Wierzejewska. Influence of the features of the spatial and electronic structure of □-substituted □-ethoxyvinyl trifluoromethyl ketones and secondary amines on their reactivity. Journal of Molecular Structure 1255 (2022) 132417.

2. J. Liu, W. Lin, A.E. Sorochinsky, G. Butler, A. Landa, J. Han, V.A. Soloshonok. Successful trifluoromethoxy-containing pharmaceuticals and agrochemicals. Journal of Fluorine Chemistry, 2022, 257-258, 109978.

3. A.A. Klipkov, I.I. Gerus, A.E. Sorochinsky. Synthesis of fluorinated pyrrolizidine, indolizidine and quinolizidine derivatives. Ukrainica Bioorganica Acta, 2022, 17, 22-39.

4. J. Han, J. Escorihuela, S. Fustero, A. Landa, V.A. Soloshonok, A. Sorochinsky. Asymmetric Michael addition in synthesis of □-substituted GABA derivatives. Molecules, 2022, 27, 3797.

5. Q. Wang, J. Han, A. Sorochinsky, A. Landa, G. Butler, V. A. Soloshonok. The latest FDA-approved pharmaceuticals containing fragments of tailor-made amino acids and fluorine. Pharmaceuticals, 2022, 15, 999.

6. V.D. Romanenko. From elusive monomeric metaphosphates to oligomeric metaphosphate reagents: New avenue to halogen-free phosphorylation of biomolecules. Current Organic Chemistry, 2022, 26, p.432-437.

7. V.D. Romanenko. The main directions of scientific activity of Academician V.P. Kukhar. Ukrainica Bioorganica Acta, 2022, 17, N 1, p.5-21.

8. Chernykh A.V., Aloshyn D., Kuchkovska Yu O., Daniliuc C. G., Tolmachova N. A., Kondratov I. S., Zozulya S., Grygorenko O. O. Haufe G. Impact of □-perfluoroalkyl substitution of proline on the proteolytic stability of its peptide derivatives. Org. Biomol. Chem., 2022, 20, 9337-9350.

9. Logvinenko I. G., Kondratov I. S., Pridma S. O., Tolmachova N. A., Morev R. N., Dolovanyuk V. G., Boretsky A. L., Stepaniuk R. O., Trofymchuk S. A., Mück-Lichtenfeld C., Daniliuc C. G., Haufe G. Synthesis and physical chemical properties of CF3O-containg secondary amines - Perspective building blocks for drug discovery. Journal of Fluorine Chemistry 2022, 257–258, 109990.

10. Homon A. A., Shynder L., Hryshchuk O. V., Grygorenko O. O., Kondratov I. S. Synthesis of novel □-trifluoromethyl cyclobutane-containing building blocks. Ukrainica Bioorganica Acta, 2022, 17 (1), 81-85.

11. Homon A. A., Shynder L. V., Demchuk O. P., Hryshchuk O. V., Kondratov I. S., Gerus I. I., Grygorenko O. O. Synthesis of 1,3-bifunctional cyclobutane derivatives with □-CHF2/CF3 group – advanced building blocks for medicinal chemistry. Journal of Fluorine Chemistry , 2022, 263, 110041.

12. Kondratov I. S., Moroz Yu. S., Irwin J. J., Shoichet B. K. Drug building blocks and libraries at risk in Ukraine. Science, 26 May 2022, 376(6596):929.

13. Kondratov I. S., Moroz Yu. S., Grygorenko O. O., Tolmachev A. A. The Ukrainian Factor in Early-Stage Drug Discovery in the Context of Russian Invasion: The Case of Enamine Ltd. ACS Med. Chem. Lett. 2022, 13, 7, 992–996.

14. Holovach S., Melnykov K. P., Poroshyn I., Iminov R. T., Dudenko D., Kondratov I. S., Levin M., Grygorenko O. O. C–C Coupling Through Nitrogen Deletion: Application to Library Synthesis. Chemistry–A European Journal 2022, in press https://doi.org/10.1002/chem.202203470

15. I.I. Gerus. □-Alkoxyvinyl polyfluoroalkyl ketones – versatile building blocks for fluoroorganic chemistry. International conference HalChem-X, 5-8 September 2022, Łódź, Poland, Book of abstracts, S03 IL-07.

16. О.М. Шайтанова, А.А. Кліпков, І.І. Герус. Нові електроциклічні реакції фторовмісних сполук. IV Українська наукова конференція "Кухарівські хімічні читання", 24 листопада 2022 р., м. Київ.

17. Ст.н.співр., к.х.н. Кондратов І.І. дав інтерв'ю різним виданням, таким як Chemistry World, C&EN, STATnews, The Medicine Maker та Wall Street Journal тощо: https://themedicinemaker.com/business-regulation/kyiv-escape-and-return; https://www.statnews.com/2022/03/14/ukraine-drug-development-kyiv-enamine/; https://bioprocessintl.com/business/the-ultimate-business-continuity-challenge-a-case-study-in-ukraine/; https://cen.acs.org/people/Chemists-respond-invasion-Ukraine/100/i9; https://www.chemi

## X. Заключні відомості

**Керівник юридичної особи** Вовк Андрій Іванович

**Перелік осіб-виконавців**

Бугера Максим Ярославович
(к.х.н., 02.00.10)

Вдовенко Сергій Іванович
(к.х.н., 02.00.04)

Долованюк Віолетта Геннадіївна
(к.х.н., 02.00.10)

Кліпков Антон Анатолійович

Кондратов Іван Сергійович
(к.х.н., 02.00.10)

Кулик Ірина Броніславівна
(к.х.н., 02.00.10)

Логвиненко Іван Геннадійович

Романенко Владислав Демидович
(д.х.н., 02.00.08)

Ручко Євгенія Володимирівна

Сорочинський Олександр Євгенович
(к.х.н., 02.00.03)

Тарасенко Карен Володимирович
(к.х.н., 02.00.10)

Федоренко Олена Андріївна

Феськов Ілля Олександрович

Хільчевський Олександр Миколайович
(к.х.н., 02.00.03)

Шайтанова Олена Миколаївна
(к.х.н., 02.00.10)

**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**