

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000128

Державний реєстраційний номер: 0120U100309

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Розробка зручних підходів до синтезу нових функціональнозаміщених азолів, азинів, макроазагетероциклів та вивчення їх біологічної активності

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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. 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, 01061, 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.): 7083.030

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:

Досліджено взаємодію 2-хлор-N-(2,2-дихлор-1-ціановініл)ацетаміду з диметиламіном. При цьому отримано 5-(диметиламіно)-2-[(диметиламіно)метил]-1,3-оксазол-4-карбонітрил, який регіоселективно алкілується йодометаном по аліфатичній диметиламіногрупі. Показано, що взаємодія наявних 1-ациламіно-2,2-дихлороетеніл(трифеніл)-фосфоній хлоридів з алканоламінами, що мають первинну аміногрупу, приводить до утворення солей 4-оксазолілфосфонію, які містять залишки гідроксиалкіламіну у п'ятому положенні оксазольного циклу. Розроблено зручний метод синтезу нових фосфорильованих пептидоміметиків, що містять С-кінцевий п-галогеноалкільний та п-тіоціаноетильний залишки, при взаємодії (2-арил-5-(гідроксиалкіламіно)-1,3-оксазол-4-іл)фосфонатів з гідроген хлоридом, гідроген йодидом та гідроген тіоціанатом в безводному середовищі. Отримано нову гетероциклічну систему 5Н-імідазо[1,2-е][1,3,5]триазепіну з високим виходом. Взаємодія вихідних 1-арил-2-азатетрахлор-1,3-бутадієнів з 2-(амінометил)імідазолом відбувається шляхом регіоселективного анелювання до імідазольного ядра триазепінового циклу.

Реферат англійською:

The interaction of 2-chloro-N-(2,2-dichloro-1-cyanovinyl)acetamide with dimethylamine was studied. This gives 5-(dimethylamino)-2-[(dimethylamino)methyl]-1,3-oxazole-4-carbonitrile, which is regioselectively alkylated with iodomethane on the aliphatic dimethylamino group. The interaction of existing 1-acylamino-2,2-dichloroteny[(triphenyl)phosphonium chlorides with alkanolamines having a primary amino group has been shown to lead to the formation of 4-oxazolylphosphonium salts having hydroxyalkylamine residues in the fifth oxo cycle. A convenient method for new phosphorylated peptidomimetics containing C-terminal p-haloalkyl and p-thiocyanoethyl synthesis has been developed in the interaction of 2-aryl-5-(hydroxyalkylamino)-1,3-oxazol-4-yl)phosphonates with hydrogen chloride and hydrogen thiocyanate in anhydrous medium. A new high-yield heterocyclic system of 5H-imidazo[1,2-e][1,3,5]triazepine was obtained. The interaction of the starting 1-aryl-2-azatetrachloro-1,3-butadienes with 2-(aminomethyl)imidazole occurs by regioselective annealing to the imidazole nucleus of the triazepine cycle.

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: Розробка зручних підходів до синтезу нових макроазагетероциклів, похідних імідазолу, 1,3-оксазолу та фосфоровмісних пептидів як продуктів розщеплення оксазольного циклу.

Назва НТП англійською: Development of convenient approaches to the synthesis of new macroazaheterocycles, imidazole derivatives, 1,3-oxazole and phosphorus-containing peptides as oxazole cycle cleavage products.

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: Роль азотистих гетероциклів є надзвичайно важливою в біологічних процесах. Тому, модифікація гетероциклу різними функціональними групами є актуальним завданням для синтетичної хімії. Особливу увагу привертають похідні оксазолу та імідазолу, серед яких виявлено значну кількість біорегуляторів з різним механізмом дії. Фосфоровмісні пептиди є продуктами розщеплення оксазольного кільця та володіють високою біологічною активністю. Серед цих сполук були виявлені селективні інгібітори клітинної цимази, глутатіонтрансферази, вазоактивні сполуки. Фосфорильовані пептиди також є цінними проміжними продуктами в синтезі деяких біологічно активних сполук. Таким чином, зважаючи на значний інтерес, нами запропоновано нові препаративні методи синтезу невідомих раніше заміщених азолів, азинів та макроазагетероциклів, а також дослідження їх властивостей. Виходи продуктів реакцій високі, для їх виділення не потрібно застосовувати енергоємних методів.

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:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Установи НАН України та освіти, Охорона здоров'я, сільське господарство.

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):

ІХ. Бібліографічний опис

1. Zhirnov V. V., Velihina Ye. S., Mitiukhin O. P., Brovarets V. S. Intrinsic drug potential of oxazolo[5,4-d]pyrimidines and oxazolo[4,5-d]pyrimidines. *Chem. Biol. Drug Des.* 2021. Vol. 98, №4. P. 561-581.
2. Angeli A., Kartsev V., Petrou A., Pinteala M., Vydzhak R., Panchishin S., Brovarets V., de Luca V., Capasso C., Geronikak A., Supuran C. New sulfanilamide derivatives in incorporating heterocyclic carboxamide moieties as carbonic anhydrase inhibitors. *Pharmaceuticals.* 2021. Vol. 14, №8. P. 828.
3. Ключко С. В., Чумаченко С. А., Шаблыкин О. В., Броварец В. С. Синтез новых 1Н-пирроло[3,4-с]пиридин-1,3(2Н)-дионов. *ЖОХ.* 2021. Т. 91, №3. С. 376-385.
4. Корний Ю. Е., Чумаченко С. А., Шаблыкин О. В., Русанов Э. Б., Броварец В. С. Новые гетероциклизации N'-замещенных N-(2,2-дихлор-1-цианоэтил)мочевин с алифатическими аминами. *ЖОХ.* 2021. Т. 91, №6. С. 841-846.
5. Циганкова В. А., Андрусевич Я. В., Штомпель О. І., Волощук І. В., Соломянний Р. М., Броварець В. С. Подібна ауксином дія похідних імідазо[1,2-с]піримідину на ріст рослин ячменю протягом періоду вегетації. Лікарське рослинництво: від досвіду минулого до новітніх технологій: зб. матеріалів доп. учасн. ІХ Міжнародної наук.-практ. конф. Полтава, 2021. С. 196-198.
6. Velihina E. S., Obernikhina N. V., Pilyo S. G., Kachkovsky O. D., Brovarets V. S. Synthesis, electronic structure and anti-cancer activity of the phenyl substituted pyrazolo[1,5-a]-[1,3,5]triazines. *Current Org. Chem.* 2021. Vol.25, №12. P. 1441-1454.
7. Biletska I. M., Mrug G. P., Bondarenko S. P., Kondratyuk K. M., Prostota Ya. O., Sviripa V. M., Frasinyuk M. S.. Chemoselective synthesis of 3-trifluoromethylpyrazole-deoxybenzoin hybrids. *J. Fluorine Chem.* 2021. Vol. 242. P. 109698.
8. Bondareko S. P., Mrug G. P., Vinogradova V. I., Frasinyuk M. S.. Synthesis of new conjugates of coumarins with anabasine and cytosine. *Chem. Nat. Compd.* 2021. Vol. 57, №1. P. 9-13.
9. Циганкова В. А., Волощук І. В., Андрусевич Я. В., Копіч В. М., Штомпель О. І., Пільо С. Г., Велігіна Є. С., Качаєва М. В., Броварець В. С.. Дослідження впливу похідних [1,3]оксазол[5,4-d]піримідину на ріст та розвиток рослин соняшнику (*Helianthus annuus* L.) сорту Бастіон. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали: зб. матеріалів доп. учасн. XXXVI Наук. конф. Київ: Інтерсервіс, 2021. С. 115-120.
10. Застосування 7-піперазин-1-іл[1,3]оксазол[4,5-d]піримідинів як нових антиракових препаратів: пат. 122925 Україна: МПК C07D 417/04, C07D 277/06, A61P 35/00. № а 201812253; заявл. 11.12.2018; опубл. 21.01.2021, Бюл. № 3.
11. Застосування 5-гідроксіалкіламіно-2-(4-метилфеніл)-1,3-оксазол-4-карбонітрилів як нових агентів проти людського цитомегаловірусу: пат. 122938 Україна: МПК C07D 263/50, C07D 263/02, A61P 31/12. № а 201903531; заявл. 08.04.2019; опубл. 20.01.2021, Бюл. № 3.
12. Спосіб інтенсифікації росту рослин кукурудзи за допомогою калієвої солі Метіуру: пат. 123222 Україна: МПК C07D 277/06, C07D 417/04, A01P 21/00. № а 201808153; заявл. 23.07.2018; опубл. 03.03.2021, Бюл. № 9.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

д. х. н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Іванова Ірина Володимирівна

(к.б.н., 02.00.10)

Абдурахманова Есма Рустемівна

(к.х.н., 02.00.10)

Білецька Ірина Михайлівна

Велігіна Євгенія Сергіївна

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)

Дідів Наталія Дмитрівна

Жирнов Віктор Валентинович

(д. мед. н., 14.03.06)

Зябров 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)

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)

Половко Тетяна Аксентіївна

Порхун Світлана Василівна

Потіха Людмила Михайлівна

(д.б.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, 02.00.10)

Циганкова Вікторія Анатоліївна

(д. б. н., 03.00.20)

Чарочкіна Лариса Леонідівна

(03.00.04)

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**

Телефон

Реєстратор

Бондаренко О.М.

+38 (044) 573-27-01

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

