

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0217U001114

**Державний реєстраційний номер:** 0111U009944

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 25-01-2017

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 5

**Назва етапу:** Розробка теоретичних та технологічних засад ресинтезу обраних генеричних лікарських субстанцій

**Початок етапу:** 01.2016

**Закінчення етапу:** 12.2016

**Вид звітнього документа:** Остаточний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка

**Код за ЄДРПОУ:** 05420735

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** +38044 5596675, +38044 5596686

#### **IV. Відомості про співвиконавців ДіР**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут органічної хімії НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417325

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:**

**Внесок співвиконавця у звітний етап:**

#### **V. Відомості про замовника ДіР**

**Повне найменування юридичної особи:** Національна академія наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 00019270

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380442396594, 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

<b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 987
--

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Розробка нових шляхів отримання гетероконденсованих систем і спрямований синтез сполук з протипухлинними властивостями на їх основі

### Назва роботи англійською:

Developing new ways for obtaining heterokondensed systems and directed synthesis of anti-tumor compounds

### Реферат українською:

Об'єкт дослідження - гетарилзаміщені 5-амінопіразоли, гетарилзаміщені піразоло[3,4-с]ізохіноліни, їх синтез та реакції циклізації. Мета роботи - розробка методів синтезу піразоло[3,4-с]ізохінолінів з гетарильними замісниками у піридиновому та бензеновому ядрах; створення комплексу технічних рішень для виробництва сполук з протираковою та іншими видами активності. Методи дослідження - органічний синтез, ЯМР-, ІЧ-спектроскопія, тонкошарова та об'ємна хроматографія, молекулярний докінг. Опрацьовано препаративні методи синтезу 1- та 3-гетарил-4(3,4-диметоксіфеніл)-5-амінопіразолів та їх відповідних галоїдпохідних. З використанням методології реакції Пікте-Шпенгера розроблено метод синтезу піразоло[3,4-с]ізохінолінів з гетероциклічними замісниками азинового ряду. Визначено відмінності реакційної здатності гетарильних естерів у реакції ацилювання арилацетонітрилів та запропоновано шляхи розвитку процесів циклізації амінопіразолів в межах сучасних уявлень реакції Шпенгера.

### Реферат англійською:

The object of study - hetaryl substituted 5-aminopyrazoles, hetaryl substituted pyrazolo [3,4-c] isoquinolines and their synthesis via cyclization reaction. The purpose of work - development of methods of synthesis of pyrazolo [3,4-c] isoquinolines with hetaryl substituents in the pyridine and benzene nuclei; creating a set of technical solutions for the manufacture of compounds with anti-cancer and other types of activity. Research methods - organic synthesis, NMR, IR spectroscopy, thin layer chromatography, and the volume, molecular docking. Formulations developed methods for the synthesis of 1- and 3-hetaryl-4 (3,4-dimethoxyphenyl) -5-aminopyrazole and their corresponding halogen derivatives. Using Pictet-Spengler reaction methodology developed synthesis method pyrazolo [3,4-c] isoquinolines with heterocyclic substituents azine series. The differences in reactivity of hetaryl carboxylic esters in the acylation reaction aryl-acetonitrile and the ways of the aminopyrazole cyclization within modern representations this reaction.

**Індекс УДК:** 547.8, 547. 72+547.833.1

**Коди тематичних рубрик:** 31.21.27.07

### Керівники роботи

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Попов Анатолій Федорович

**Науковий ступінь:** д. х. н.

**Наукове звання:** професор, акад.

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Методи отримання нових гетероконденсованих систем та нових активних блоків зі скаффолдами гетероконденсованих ізохінолінів та 1,2-діазепинів.

**Назва НТП англійською:** Methodes of a new heterokondensed systems synthesis and new active blocks with heterokondensed isoquinoline and 1,2-benzodiazepine scaffold.

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:**

**Галузь застосування:** 72.19 - Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Розроблено ефективні та придатні до масштабування методи синтезу 3,5-дигідро-1Н-2,3-бензодіазепин-1-она, його тіо- та гідразиноподібних, нових гетероциклічних систем: 5,7-дигідропіроло[3,4-d][1,2]діазепин-1(2Н)-ону, 7Н-[1,2,4]триазоло[3,4-a][2,3]бензодіазепину, 7Н-тетразоло[5,1-a][2,3]діазепину, 7,9-дигідропіроло[3,4-d][1,2,4]триазоло[4,3-b][1,2]діазепину, 7,9-дигідропіроло[3,4-d]тетразоло[1,5-b][1,2]діазепину, піроло[3,4-c]піридину - привабливих об'єктів для біологічного скринінгу, що можуть бути використані в галузі фармацевтичної хімії.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:**

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** не визначено

**Закінчення етапу:**

**Споживачі продукції:** наукові та освітні установи

**Перспективні ринки:** наука, освіта

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:** 0

**Права, що надаються інвестору після завершення роботи:**

**Наявність бізнес-плану:** Ні

**Техніко-економічне обґрунтування:** Ні

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:** 0

**Очікуваний термін окупності (років):** не визначено

**Додаткова інформація:** За договором

## **IX. Бібліографічний опис**

1. Ерьсько А.Б., Толкунов В.С., Мазепа А.В., Толкунов С.В. Конденсированные 1,2-дiazепины. Синтез и модификация структур 1-R-3,5-дигидро-4H-бензофуоро[2,3-d][1,2]diazепин-4-онов, 1-R-3,5-дигидро-4H-бензотиено[2,3-d][1,2]diazепин-4-онов, 1-R-5,10-дигидро[1,2]diazепино[4,5-b]индол-4(3H)-онов // Химия гетероциклических соединений. Современные аспекты.- М.: МБФНП, 2014.- Т.1.- С.178-184. 2. Толкунов А.С., Богза С.Л., Мазепа А.В., Толкунов С.В. Реакция Пикте-Шпенгера в синтезе конденсированных 1,2-дiazепинов // Химия гетероциклических соединений. Современные аспекты.- М.: МБФНП, 2014.- Т.1.- С. 448-455. 3. Толкунов А.С., Богза С.Л., Мазепа А.В., Толкунов С.В. 2,3-Дигидро-2-оксо-5-R-1H-[1,2]diazепино[4,5-b]индолы // Химия гетероциклических соединений. Современные аспекты.- М.: МБФНП, 2014.- Т.2. - С. 163-164. 4. Толкунов А.С., Богза С.Л., Мазепа А.В., Толкунов С.В. 6-(4-Хлорфенил)-9-R-3-метил-12H-[1]бензофуоро[3,2-e][1,2,4]триазоло- [4,3-b][1,2]diazепины // Химия гетероциклических соединений. Современные аспекты.- М.: МБФНП, 2014.- Т.2. - С. 158-160. 5. E.S. Sizonenko, I.K. Kobrakov, V.Y. Popov, S.Y. Suikov, S.L.Synthesis of 2-R-2-(1-Aryl-7, 8-Dimethoxy-5H-2, 3-Benzodiazepin-4-yl) Acetic Acid Esters in the Eschenmoser Reaction // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga (SPRINGER) 49 (9), 1352-1357 (2013). 6. O. Kharaneko, V. Popov, S. Bogza 4-Aryl-1-hydrazino-5 H-2, 3-benzodiazepine and 1-aryl-4-hydrazino-5 H-2, 3-benzodiazepine in the synthesis of condensed [1, 2] diazepines. // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga (SPRINGER) 49 (2), 317-324 (2013). 7. O.I. Kharaneko, S.L. Bogza Novel Strategy for the Synthesis of the Pyrrolo [3, 4-d][1, 2] diazepine Heterocyclic System // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga (SPRINGER) 48 (11), 1734-1735 (2013). 8. A.S. Tolkunov, V.N. Baumer, G.V. Palamarchuk, O.V. Shishkin, A.V. Mazepa. Modification of the Pictet-Spengler reaction in the synthesis of fused 2, 3-benzodiazocines // Chemistry of Heterocyclic Compounds Riga (SPRINGER) 47 (8), 1006-1013 (2011). 9. Bogza S.L., Nikolaev O.S., Geleverya A.O., Gurtova K.V.Synthesis of pyrimidine analogs homophthalic acid from dimethyl ester acetonedicarboxylate by the Biginelli reaction // Scientific notes of the Tauride National University of Vernadsky. Series Biology, Chemistry 26(4) 307-314 (2013) Tauride National University of Vernadsky. 10. Харанеко О.И., Суйков С.Ю., Богза С.Л. Новые гетероциклические системы с 1,2-дiazепиновым циклом // Матер. докл. XII научно-практич. семинара и коорд. совета НАН Украины; Научные основы создания лекарственных средств". - Гурзуф, 28-30.05. - 2012.- С.56-64. 11. S.Yu. Zinchenko, S.L. Bogza, S.Y. Sujkov, V.V. Pendyukh. Heteroannelated isoquinolines with sterically hindered phenol core // Scientific notes of the Tauride National University of Vernadsky. Series Biology, Chemistry 26(4) 270-275 (2013) Tauride National University of Vernadsky. 12. С. Л. Богза, И. К. Кобраков, В. Ю. Попов, Е. С. Сизоненко, С. Ю. Суйков 1-Арил-4-(2-оксоалкил) тио-2,3(5H)-бензодiazепины в реакции Эшенмозера // Вісник Харківського нац. ун-ту ім. В. Н. Каразіна. Хімія (rus) 21(1026), вип.21(44) с.122-125 (2012). 13. С.Ю. Зінченко, І.К. Кобраков, В.Н. Кошелєв, С.Л. Богза. Синтез спиропроизводных пиразоло- и тиено[3,4-С]изохинолина // Вісник ДоННУ, серія А: Природничі науки.- 2012.- №2.- С 115-119. 14. С.Л. Богза. Новые гетероциклические системы для новых лекарств // Наука та інновації.- Вид. НАН України, Київ - 2015.- Т.11, № 6.- С. 85-93.

## **Х. Заключні відомості**

**Керівник юридичної особи**

Попов Анатолій Федорович

### **Перелік осіб-виконавців**

Бородкін Я.С.

Білобров В.М.

Гресько С.В.

Коваль Т.С.

Матвієнко А.Г.

Ніколаєв О.С.

Смирнова О.В.

Суйков С.Ю.

Толкунов А.С.

Толкунов В.С.

Толкунов С.В.

Хіжан О.І.

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Телефон**

**Реєстратор**

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

