

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000131

Державний реєстраційний номер: 0121U110488

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Аналіз та селекція біокатализаторів, що можуть бути використані для одержання хіральних гетероциклічних, фторо- та фосфороорганічних сполук. Розробка нових методів розділення рацематів за допомогою ферментативної транс-естерефікації та ферментативного гідролізу естерів. Дослідження абсолютної конфігурації та оптичної чистоти синтезованих сполук

Початок етапу: 04.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього 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. Мурманська, буд. 1, м. Київ, Київська обл., 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, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Президія Національної академії наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981, 380442262341, www.nas.gov.ua

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): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 650.000
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Ферментативна дерацемізація і синтез хіральних потенційно біоактивних сполук

Назва роботи англійською:

Enzymatic deracemisation and synthesis of chiral potentially bioactive compounds

Реферат українською:

По результатах науково роботи були проведені дослідження по розробці реагентів асиметричного синтезу і кінетичної ферментативної розділення рацематів і застосування їх для отримання нових біологічно активних сполук. За допомогою ензиматичних методів розділення рацемічних інденолів і наступної їх функціоналізації, були одержані похідні фармакофорних сполук (інденолі, дегідроінденолі, дегідроіндендіоли,) високого ступеню оптичної чистоти. Проведено біокаталітичне очищення похідних галогенциклоалканолів, фтораміноалканів, аміноциклопентанолів та ін., та одержані нові оптично активні речовини. Вперше встановлено вплив ефекту Кошланда з пристосуванням активного центру ферменту до форми субстрату на перебіг реакцій ензиматичного розділення. Запропоновано простий метод визначення абсолютній конфігурації похідних інденолів та функціоналізованих віцинальних циклоалканолів з використанням хіральної рідинної хроматографії. Проведені біологічні дослідження in Silico синтезованих сполук з використанням молекулярного докінгу. На прикладі ряду ферментів показано залежність інгібуючої активності енантіомерів сполук від абсолютної конфігурації

Реферат англійською:

According to the results of scientific work, research was conducted on the development of reagents for asymmetric synthesis and kinetic enzymatic resolution of racemates and their use to obtain new biologically active compounds. With the help of enzymatic methods of resolution of racemic indenols and their subsequent functionalization, derivatives of pharmacophore compounds (indenols, dehydroindenols, dehydroindendiols,) of high degree of optical purity were obtained. Biocatalytic purification of halocycloalkanol derivatives, fluoroaminoalkanes, aminocyclopentanols, etc. was carried out, and new optically active substances were obtained. The influence of the Koshland effect with the adaptation of the active center of the enzyme to the shape of the substrate on the course of enzymatic separation reactions was established for the first time. A simple method for determining the absolute configuration of indenol derivatives and functionalized vicinal cycloalkanols using chiral liquid chromatography was proposed. Biological researches in Silico of synthesized compounds using molecular docking have been performed. The dependence of the inhibitory activity of compound enantiomers on the absolute configuration is shown on the example of a number of enzymes

Індекс УДК: 547.9;577.1

Коди тематичних рубрик: 31.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Колодяжна Анастасія Олегівна

Науковий ступінь: д.х.н.

Наукове звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Реагенти асиметричного синтезу, біокаталітичне очищення, ензиматичні методи розділення, енантімерно чисті похідні інданолів, функціоналізованих віцинальних циклоалканолів та аміноциклоалканів, дослідження біологічної активності.

Назва НТП англійською: Reagents for asymmetric synthesis, biocatalytic purification, enzymatic separation methods, enantiomerically pure derivatives of indanols, functionalized vicinal cycloalkanols and aminocycloalkanes, research of biological activity.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Хімія, медицина, фармакологія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Була виконана розробка стереоселективних методів одержання потенційно біологічно активних сполук. Були проведені дослідження по розробці реагентів асиметричного синтезу і кінетичної ферментативної рацемізації і застосування їх для отримання нових біологічно активних сполук. За допомогою біокаталітичних методів розділення рацемічних сполук із наступною функціоналізацією синтезованих енантімерно чистих речовин були одержані похідні цілого ряду потенційно біологічно активних структур високого ступеню оптичної чистоти.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, розроблені методи синтезу, що використовують доступні і дешеві природні сполуки. Методи синтезу, що використовують біокаталіз, що ґрунтуються на використанні нешкідливих і нетоксичних прир

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Вищі навчальні заклади (університети, інститути, академії), науково-дослідні інститути

Перспективні ринки: Україна, Науково-дослідні державні та приватні підприємства, що займаються розробкою біоактивних препаратів, фармпрепаратів та агрохімікатів.

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):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

1 D.V. Prisyazhnyuk / The absolute configuration of 2-bromo-2,3-dihydro-1H-inden-1-ols.// D.V. Prisyazhnyuk, E.B. Rusanov O.I.Kolodiazhnyi. Synthetic Communications. 2021.-Vol. 51.- N 19.-P. 3023–3031.

2 O. O. Kolodiazhna, / Synthesis of optically active vicinal fluorocyclopentanols and fluorocyclopentanamines by enzymatic deracemization //O. O. Kolodiazhna, D. V. Prisyazhnyuk, A. O. Kolodiazhna, O. I. Kolodiazhnyi Arkivoc. 2021.- Vol. III.-P. 14–26.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

д.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Колодяжна Ольга Олегівна

(к.х.н., 02.00.10)

Присяжнюк Дмитро Вячеславович

Татарчук Альона Віталіївна

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

