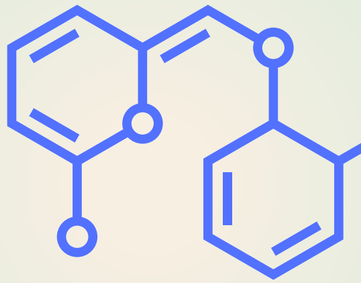
Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара



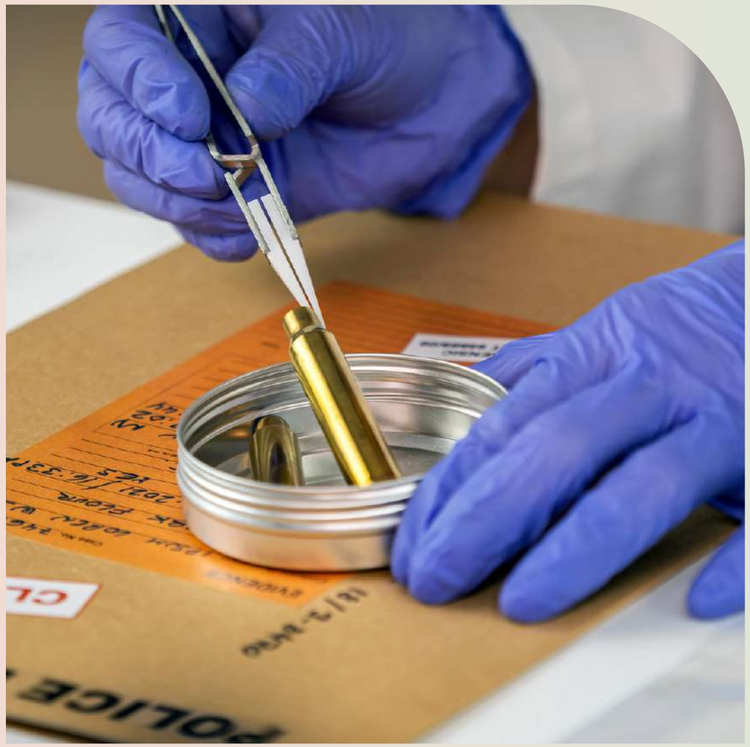
НОВІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНІ ТА ЕНЕРГОЄМНІ ГЕТЕРОПОЛІЦИКЛІЧНІ СПОЛУКИ. СИНТЕЗ, МОДИФІКАЦІЯ, ТЕОРЕТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ТА ПРОЦЕСІВ ТРАНСФОРМАЦІЇ

Мета НДР: розробка методів синтезу білдинг-блоків та інших практично-корисних речовин для потреб комбінаторної хімії, технології високопродуктивного біоскринінгу, сільського господарства, військово-промислового комплексу на основі гетероциклічних речовин різних типів, а також in silico, in vivo та in vitro дослідження комбінаторних бібліотек нових речовин на їх основі.

Керівник НДР: **проф. С. І. Оковитий**

ВПЕРШЕ ОТРИМАНІ НАУКОВІ РЕЗУЛЬТАТИ

Створено мікроекстракційну методику визначення йодиду в мінеральній воді, сульфітів у харчових продуктах, методику одночасного визначення рутину та аскорбінової кислоти, яка використовує комбінацію послідовного інжекційного аналізу і зовнішнього реактора.

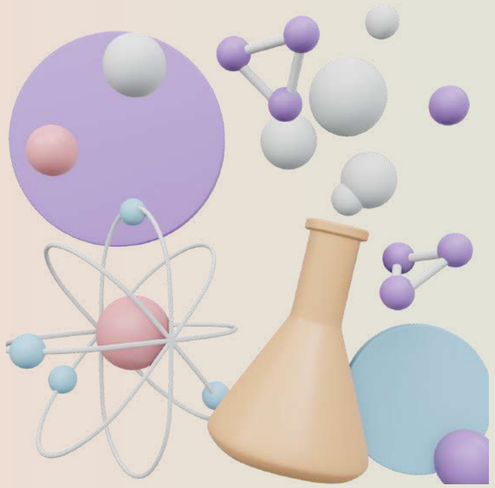


Розроблено набори базисних функцій, які вперше включають поправки другого порядку за електричним полем, що дозволяє значно підвищити точність розрахунків спектральних характеристик молекул.

Запропоновано нову концепцію моделювання молекулярних орбіталей Хартрі-Фока-Рутана, яка становить основу для побудови ефективного алгоритму і створення комп'ютерних FORTAN програм для розрахунків низько-збуджених станів однакової симетрії, які не мають закордонних аналогів. На противагу наявним методам розрахунку кореляційної енергії збуджених станів, що потребують використання мільярдів конфігурацій, запропоновано ефективний підхід, заснований на поєднанні теорії збурень Меллера-Плесета і метода асимптотичного проєктування.

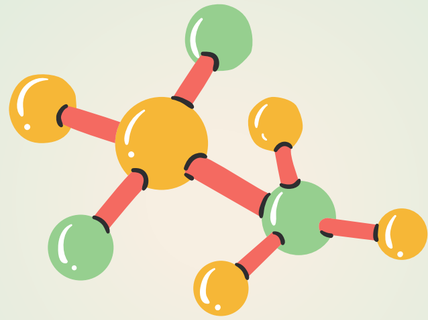
Запропоновано нову загальну синтетичну стратегію отримання піразоло[3,4-d]піридазинових систем, які не містять замісника біля атома С-3 та містять трифторметильну групу в 4-му положенні гетероциклічної системи.

Розроблено та запатентовано декілька альтернативних методів синтезу природного регулятору згортання крові «*HEFS*».



Отримано зразки нових каталітичних систем та енергоємних матеріалів на основі поліазагетероциклів, а також епоксидовмісних полімерів.

ПРАКТИЧНА ЦІННІСТЬ НДР



Отримано три нові комбінаторні бібліотеки на основі похідних триазин-2-ону, хіназолін-2-ону та хіназоліну, проведено дослідження протисудомної активності для широкого кола цих сполук. Виявлено сполуки-лідери, активність яких знаходиться на рівні препарату Ламотриджин.

Розроблено методи синтезу нових представників гетерополіциклічних сполук: 2-аміно-4-арил-4,6,7,8-тетрагідротіопірано[3,2-]піран-3-карбонітрил-5,5-діоксидів, 7-аміно-5-арил-3,4-дигідро-1H-ізотіохромен-6,8-дикарбонітрил-2,2-діоксидів, сульфоланвмісних триазолів, оксазолідин-2-онів і морфолінів, 3-оксо-4-аза-11-оксатетрацикло[5.2.1.15,8.02,6] ундеканів.

Вперше на основі реакції N-заміщених аміноетанолів з циклічними β- та γ-кетосульфонами запропоновано метод синтезу двох нових спіроциклічних систем: 1-окса-7-тіа-4-азаспіро[4.5]декан-7,7-діоксидної та 1-окса-8-тіа-4-азаспіро[4.5]декан-8,8-діоксидної відповідно.

Дослідження методів синтезу енергонасичених координаційних сполук дозволило запропонувати прості методи їх отримання, що не потребують дорогих каталізаторів, розчинників і спеціального обладнання для проведення реакцій під вакуумом.

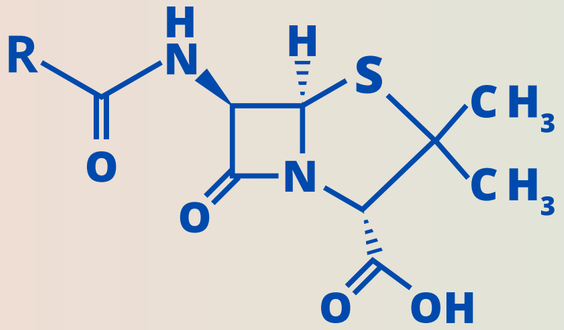
Розроблено методику синтезу наноразмірних порошків та оксидів металів, отримано результати дослідження їх ефективності як каталізаторів хімічних реакцій.

ПУБЛІКАЦІЇ

- 45 статей (із них 35 у базі Scopus).
- 10 патентів України.
- 1 заявка на патенти.
- 56 тез конференцій (із них 10 закордонних).

НАУКОВА НОВИЗНА І ЗНАЧИМІСТЬ РЕЗУЛЬТАТІВ

Одержані зразки нових каталітичних систем становлять інтерес як потенційні компоненти СТРП та матеріалів з підвищеною енергоємністю. Ефективність нових енергонасичених сполук як регуляторів швидкості горіння СТРП було підтверджено під час проведення промислових випробувань на базі Державного підприємства «Науково-виробниче об'єднання «Павлоградський хімічний завод».



Рівняння Хартрі-Фока і теорії збурень для збуджених станів частково імплементовані і використовуються в комп'ютерних програмах лабораторії теоретичної хімії і біохімії (Université de Lorraine, Vandoeuvre-les-Nancy, Франція).

За результатами роботи отримано патенти України на винаходи та корисні моделі, що стосуються способів синтезу 5-етил-2-гексилфуран-3-сульфокислоти «HEFS», спіроконденсованих похідних [1,2,4]триазино[2,3-с]хіназоліну, похідних ендикового ангідриду та каркасних амінів, які мають фунгібактерицидну активність та нового способу бромування фуранів. Ці сполуки становлять інтерес для компаній, що спеціалізуються на фармацевтичному бізнесі.

Розроблено методики синтезу та отримано ряд нових азаполіциклічних каркасних амінів, які наразі проходять дослідження на противірусну активність в ДЦ «Біомодуляторів та лікарських засобів».

На основі промислово та комерційно доступних простих вихідних речовин синтезовано ряд нових комерційно-привабливих реагентів (так звані білдинг-блоки), які можуть бути використані у комбінаторній і медичній хімії, а також на ранніх етапах розробки нових лікарських засобів.

Ці речовини становлять певний інтерес як об’єкти купівлі-продажу між університетами та хімічними компаніями, оскільки здебільшого вони відсутні в комерційних каталогах вітчизняних і зарубіжних хімічних компаній виробників аналогічної продукції *(фото)*.

ЗАЛУЧЕННЯ ПОЗАБЮДЖЕТНИХ КОШТІВ

Спільно із ДП «КБ «Південне» ім. М.К. Янгеля» (м. Дніпро) ведуться госпдоговірні роботи на тему: «Розробка пакета документів, який містить вихідні дані для розробки проєктної документації на створення виробничо-експериментального комплексу виготовлення фероцену і його похідних ВЕК «Ф»».

Придбано сучасний газовий хромато-мас-спектрометр Shimadzu GCMS-QP2010 (країна-виробник – Японія, ціна 80 тис. євро), на якому ведуться роботи за проєктом (*фото*).