Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U100874

Державний реєстраційний номер: 0119U000243

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-01-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез та встановлення структури нових N-ацил-1,4-бензохінонімінів - похідних N-ариламінокарбоніл(карбамоїл)-1,4-бензохінонмоноімінів.

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Донбаська державна машинобудівна академія

Код за ЄДРПОУ: 02070789

Місцезнаходження: вул. Академічна, буд. 72, м. Краматорськ, Донецька обл., 84313, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380626416809

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 300

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез, структура та реакційна здатність нових N-ацил-1,4-бензохінонімінів. Нові біологічно активні сполуки і присадки для технологічних рідин.

Назва роботи англійською:

Synthesis, structure and reactivity of new N-acyl-1,4-benzoquinoneimines. New bioactive compounds and additives for technological liquids.

Реферат українською:

Об'єктом дослідження є N-ацил-1,4-бензохіноніміни. Предметом дослідження є синтез нових невідомих раніше N-ацил-1,4-бензохінонімінів – N-ариламінокарбоніл(карбамоїл)-1,4-бензохінонмоноімінів та їх похідних, розробка простих доступних методів їх синтезу, встановлення структури отриманих сполук. Методи: органічний синтез, NMR 1H і 13C спектроскопія, ІЧ-спектроскопія, квантово-хімічні розрахунки, елементний аналіз. Розроблено препаративні методики синтезу і вперше синтезовано нові невідомі раніше N-ариламінокарбоніл(карбамоїл)-1,4-бензохінонмоноіміни і їх похідні з різноманітними замісниками в хиноїдному ядрі, які з одного боку є N-моноарилзаміщеними сечовинами, а з іншого – похідними N-ариламінокарбоніл(карбамоїл)-1,4-бензохінонмоноімінів. Поєднання властивостей хінонімінів і сечовини в одній сполуці значно розширює синтетичні можливості отримання нових похідних на їх основі, що дозволило отримати нові похідні на основі N-карбамоїл-1,4-бензохінонмоноімінів – N-(N'-фенілкарбаміл)карбамоїл-1,4-бензохінонмоноіміни, 4-(4-гідроксифеніл)-семикарбазиди, 4-(4-гідроксифеніл)-1-ацетил(бензоїл, тозил)семикарбазиди. Наукова новизна: розроблено прості зручні методики синтезу нових N-ацил-1,4-бензохінонімінів – N-ариламінокарбоніл(карбамоїл)-1,4-бензохінонмоноімінів і похідних на їх основі; поєднання властивостей двох класів (хінонімінів і сечовини) в одній сполуці дозволило значно розширити межи напрямів синтезу нових похідних N-заміщених-1,4-бензохінонмоноімінів; встановлено, що в розчинах N-ариламінокарбоніл- та N-карбамоїл-1,4-бензохінонмоноімінів спостерігається не тільки Z,E-ізомеризації відносно зв'язку C=N хіноїдного ядра, що перебігає за інверсійним механізмом, а й загальмоване обертання навколо зв'язку –NH–C(O)–.

Реферат англійською:

The object of the study is N-acyl-1,4-benzoquinoneimines. The matter of the study is the synthesis of new earlier unknown N-acyl-1,4-benzoquinimines, N-arylaminocarbonyl(carbamoyl)-1,4-benzoquinone monoimines and their derivatives, the development of simple methods for their synthesis, the determination of structure of the compounds obtained. Methods: organic synthesis, NMR 1H and 13C spectroscopy, IR spectroscopy, quantum chemical calculations, elemental analysis. Preparative synthesis techniques have been developed and new previously unknown N-arylaminocarbonyl(carbamoyl)-1,4-benzoquinone monoimines and their derivatives with various substituents in the quinoid ring have been synthesized. These compounds are both N-monoaryl-substituted ureas and the derivatives of N-arylaminocarbonyl(carbamoyl)-1,4-benzoquinone monoimines. The combination of properties of quinonimines and urea in one compound greatly extends the possibilities of synthesis of new their derivatives. That allow to obtain new derivatives based on N-carbamoyl-1,4-benzoquinone monoimines, N-(N'-phenylcarbamyl)carbamoyl-1,4-benzoquinone monoimines, 4-(4-hydroxyphenyl)-semicarbazides, 4-(4-hydroxyphenyl)-1-acetyl (benzoyl, tosyl)semicarbazides. The scientific novelty: The simple methods of synthesis of new N-acyl-1,4-benzoquinoneimines, N-arylaminocarbonyl(carbamoyl)-1,4-benzoquinone monoimines and their derivatives, have been developed; the combination of properties of two classes (quinonimines and urea) in one compound made it possible to significantly extend the bound in the synthesis of new derivatives of N-substituted-1,4-benzoquinone monoimines; it has been found that in the solutions of N-arylaminocarbonyl- and N-carbamoyl-1,4-benzoquinone monoimines the both Z,E-isomerization and retarded

rotation around –NH–C(O)– bond is observed. The mechanism of Z,E-isomerization with respect to C = N bond of the quinoid ring is the inversion.

Індекс УДК: 547.51, 547.567.5

Коди тематичних рубрик: 31.21.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Авдєєнко Анатолій Петрович

Науковий ступінь: к. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Зразки і спектри N-карбамоїл-1,4-бензохінонмоноімінів та їх похідних – N-(N'-фенілкарбаміл)карбамоїл-1,4-бензохінонмоноімінів, 4-(4-гідроксифеніл)-семикарбазидів, 4-(4-гідроксифеніл)-1-ацетил(бензоїл, тозил)семикарбазидів.

Назва НТП англійською: Samples and spectra of N-carbamoyl-1,4-benzoquinone monoimines and their derivatives – N-(N'-phenylcarbamyl)carbamoyl-1,4-benzoquinone monoimines, 4-(4-hydroxyphenyl)-semicarbazides, 4-(4-hydroxyphenyl)-1-acetyl(benzoyl, tosyl)semicarbazides.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Вперше синтезовано N-карбамоїл-1,4-бензохінонмоноіміни та їх похідні – N-(N'-фенілкарбаміл)карбамоїл-1,4-бензохінонмоноіміни, 4-(4-гідроксифеніл)-семикарбазиди, 4-(4-гідроксифеніл)-1-ацетил(бензоїл, тозил)семикарбазиди. Розроблено оптимальні методик їх синтезу. Встановлено структуру і спектральні характеристики синтезованих сполук. Синтезовані сполуки є потенційними біологічно активними сполуками і синтонами для синтезу на їх основі нових гетероциклічних біологічно активних сполук, зокрема, лікарських препаратів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:** 09.2022
- **Закінчення етапу:** 06.2023

Споживачі продукції: лабораторії органічного синтезу, фармацевтичні компанії

Перспективні ринки: Україна, лабораторії органічного синтезу різних країн світу

Характер співробітництва з інвестором

- **Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**
- **Права, що надаються інвестору після завершення роботи:** Права не надаються
- **Наявність бізнес-плану:** Ні
- **Техніко-економічне обгрунтування:** Ні
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**
- **Очікуваний термін окупності (років):**
- **Додаткова інформація:**

IX. Бібліографічний опис

1. Авдеенко А.П., Коновалова С.А. Стружкодробление при резании вязких труднообрабатываемых сплавов. Матеріали Міжнародної науково-технічної конференції «Важке машинобудування. Проблеми та перспективи розвитку». 04 – 07 травня 2019 року. – Краматорськ: ДДМА, 2019. – С. 8.

2. Авдєєнко А.П., Коновалова С.О. Активований стерично напружений зв'язок C=N в N-заміщених п-хінонімінах. XVII Наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2019». Збірник наукових праць. 2-5 червня 2019 р. Львів – 2019. С. 120.

3. Dašić P., Turmanidze R., Avdeenko A.P. Review on hard machining with minimal cutting fluid application. Journal of Research and Development in Mechanical Industry (JRADMI), 2018. □ Vol.10. □ Issue 3. □ P.101□120.

4. Kuz□menko L., Avdeenko A., Konovalova S., Vasylyuk S. Synthesis and investigation of pesticidal activity of some N-arylthio-1,4-benzoquinine imines. Biointerface Research in Applied Chemistry. 2019, Vol.9. □ Issue 5. □ P.4232□4238.

5. Авдєєнко А.П., Коновалова С.О. Активований стерично напружений зв□язок C=N в циклогексенових структурах на основі N-заміщених п-хінонімінів. Тези доповідей ювілейної XXV Української конференції з органічної хімії, Луцьк, 2019. □ С.57.

6. Коновалова С.О., Авдєєнко А.П., Холмовой Ю.П., Санталова Г.О. N-(4-оксоциклогекса-2,5-дієн-1-іліден)-2-арилацетаміди та N-(4-гідроскифеніл)-2-арилацетаміди. Заявка на патент U201911336 від 21.11.2019.

7. Коновалова С.О., Авдєєнко А.П., Холмовой Ю.П., Санталова Г.О. N-(4-оксоциклогекса-2,5-дієн-1-іліден)-3-фенілпроп-2-єнаміди та N-(4-гідроскифеніл)-3-фенілпроп-2-єнаміди. Заявка на патент U201911335 від 21.11.2019.

8. Коновалова С.О., Авдєєнко А.П., Холмовой Ю.П., Санталова Г.О. N-(4-оксоциклогекса-2,5-дієн-1-іліден)-2-феноксіацетамід та N-(4-гідроскифеніл)-2-феноксіацетамід. Заявка на патент U201911333 від 21.11.2019.

9. Авдєєнко А.П., Холмовой Ю.П., Коновалова С.О., Юсіна Г.Л.Спосіб вимірювання окисно-відновних потенціалів N-заміщених п-хінонімінів. Заявка на патент U201911332 від 21.11.2019.

10. Авдєєнко А.П., Санталова Г.О., Коновалова С.О., Холмовой Ю.П. Циклогекса-2,5-дієн-1,4-діон-4-[S-(1н-бензімідазол{оксазол, тіазол}-2-іл)тіооксими] та циклогекса-2,5-дієн-1,4-діон-4-[S-(4н-1, 2, 4-триазол-3-іл)тіооксими]. Заявка на патент U201911337 від 21.11.2019.

11. Авдєєнко А.П., Санталова Г.О., Коновалова С.О., Марченко І.Л. 2,5-Диметилциклогекса-2,5-дієн-1,4-діон-S-(етоксікарбонотіоіл)тіооксим] та 2,6-диметилциклогекса-2,5-дієн-1,4-діон-4-[S-(етоксікарбонотіоіл)тіооксим]. Заявка на патент U201911334 від 21.11.2019.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Турчанін Михайло Анатолійович
д. х. н., 02.00.04

Перелік осіб-виконавців

Відповідальний за підготовку облікових документів Авдєєнко Анатолій Петрович

Телефон +38 (062) 641-67-01

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності