Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U100873

Державний реєстраційний номер: 0118U004009

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-01-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Розробка методик синтезу нових похідних тіосечовини.

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітного документа: Без звіту

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): Донецький національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010698

Місцезнаходження: вул. Привокзальна, 27, с. Лиман, Добропільський р-н., Донецька обл., 84404, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров`я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0990603665

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 52 - договір з вітчизняною організацією (органами місцевої ради, фондом, асоціацією, концерном тощо)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7706 - безплатно (договір про науково-технічне співробітництво, тощо)

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез нових потенційно активних сполук на основі похідних сечовини та тіосечовини, прогнозування їх біологічної активності.

Назва роботи англійською:

Synthesis of new potentially active compounds based on urea and thiourea derivatives, prediction of their bioactivity.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: N-заміщені-N'-ацилтіосечовини та продукти їх взаємодії з дінуклеофілами. Мета дослідження: синтез похідних тіосечовини, вивчення їх реакцій з дінуклеофілами; отримання на основі похідних тіосечовини нових гетероциклічних сполук та пошук серед них за допомогою програми PASS можливої біологічної активності. Методи дослідження: фізико-хімічні методи дослідження речовин – спектроскопія протонного магнітного резонансу, спектроскопія ядерного магнітного резонансу ядер 13С, інфрачерво́на спектроскопія, мас-спектрометрія, елементний аналіз. Теоретичні і практичні результати: Встановлено, що реакція отриманих похідних 3-аміно-1,2,4-триазолів з оцтовим ангідридом протікає без каталізаторів з утворенням 2 ацетил-3-ариламіно-5-феніл-1,2,4-триазолів і 2-ацетил-3-(піридил-2-іл)аміно-5-феніл-1,2,4-триазолів в якості основних продуктів. Ацетилювання 1,5-дизаміщених-3-аміно-1,2,4-триазолів оцтовим ангідридом відбувається по екзоцікліческому атому нітрогену. Отримані в даних реакціях ацетилтриазоли - досить стабільні сполуки; вони витримують короткочасне нагрівання у воді, апротонних органічних розчинниках, стійкі при зберіганні в звичайних умовах. Будову синтезованих сполук було вивчено на основі поєднання різних сучасних фізико-хімічних методів дослідження. Структурні особливості отриманих сполук дозволяють вступати у множинні нековалентні взаємодії з біополімерами за допомогою водневих зв'язків, π ... π-стекінгу та ін. Це робить їх перспективними об'єктами для пошуку нових біологічно активних сполук. Ефективність впровадження: 2 ацетил-3-ариламіно-5-феніл-1,2,4-триазоли і 2 ацетил-3-(піридил-2-іл)аміно-5-феніл-1,2,4-триазоли є потенційними біологічно активними сполуками і можуть використовуваться в якості лікарських препаратів, пестицидів. Сфера (галузь) застосування: в загальних та спеціальних курсах органічної хімії у університетах. Серед отриманих продуктів можна вести пошук нових лікарських препаратів.

Реферат англійською:

Object of research: N-substituted-N'-acylthioureas and products of their interaction with dinucleophiles. Objective of research: synthesis of derivatives of thiourea, study of their reactions with dinucleophiles; obtaining of new heterocyclic compounds based on the thiourea derivatives and determine of their possible biological activity using the PASS program. Research methods: physical and chemical methods for the investigation of compounds: IR, NMR 1H, NMR 13C spectroscopy, elemental analysis. Theoretical and practical results: It was found the reaction of the obtained derivatives of 3-amino-1,2,4-triazoles with acetic anhydride proceeds without catalysts with the formation of 2 acetyl-3-arylamino-5-phenyl-1,2,4-triazoles and 2 acetyl-3-(pyridyl-2-yl)amino-5-phenyl-1,2,4-triazoles as major products. Acetylation of 1,5-disubstituted-3-amino-1,2,4-triazoles with acetic anhydride occurs on the exocyclic nitrogen atom. Acetyltriazoles obtained in these reactions are fairly stable compounds; they are stable at short-term heating in water, aprotic organic solvents, and they are stable when stored under normal conditions. The structure of the synthesized compounds was studied on the basis of a combination of various modern physicochemical methods. The structural features of the obtained compounds allow to enter into multiple non-covalent interactions with biopolymers by hydrogen bonds, π ... π-stacking, etc. Thus these new compounds are good objects for the search for new bioactive compounds. Efficiency of introduction: 2-acetyl-3-arylamino-5-phenyl-1,2,4-triazoles and 2-acetyl-3-(pyridyl-2-yl) amino-5-phenyl-1,2,4-triazoles are potential biologically active

compounds and can be used as drugs, pesticides. Application area: in the general and special courses of organic chemistry in universities. The products obtained in this work can be tested as new drugs.

Індекс УДК: 547.2/.4, 31.21.21

Коди тематичних рубрик: 31.21.21

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 2 ацетил-3-ариламіно-5-феніл-1,2,4-триазолів і 2 ацетил-3-(піридил-2-іл)аміно-5-феніл-1,2,4-триазолів.

Назва НТП англійською: Samples of 2-acetyl-3-arylamino-5-phenyl-1,2,4-triazoles and 2-acetyl-3-(pyridyl-2-yl) amino-5-phenyl-1,2,4-triazoles.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції. Виробництво основних фармацевтичних продуктів і фармацевтичних препаратів.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Засвоєна методика ацетилювання 1,5-дизаміщених-3-аміно-1,2,4-триазолів оцтовим ангідридом. Синтезовані ацетилтриазоли – 2 ацетил-3-ариламіно-5-феніл-1,2,4-триазоли і 2 ацетил-3-(піридил-2-іл)аміно-5-феніл-1,2,4-триазоли. Знайдено, що для перебігу реакції похідних 3-аміно-1,2,4-триазолів з оцтовим ангідридом не потрібен каталізатор. Ацетилювання 1,5-дизаміщених-3-аміно-1,2,4-триазолів оцтовим ангідридом відбувається по екзоциклическому атому нітрогену. Отримані в даних реакціях ацетилтриазоли - досить стабільні сполуки; вони витримують короткочасне нагрівання у воді, апротонних органічних розчинниках, стійкі при зберіганні в звичайних умовах. Будову синтезованих сполук було вивчено на основі поєднання різних сучасних фізико-хімічних методів дослідження. Структурні особливості отриманих сполук дозволяють вступати у множинні нековалентні взаємодії з біополімерами за допомогою водневих зв'язків, л ... л-стекінгу та ін. Це робить їх перспективними об'єктами для пошуку нових біологічно активних сполук.

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: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Споживачі продукції: Класичні університети, кафедри органічної хімії

Перспективні ринки: Україна

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

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.

X. Заключні відомості

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

Перелік осіб-виконавців

Авдєєнко Анатолій Петрович
(к. х. н., 02.00.03)

Коновалова Світлана Олексіївна
(к.х.н., 02.00.03)

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