Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U101853

Державний реєстраційний номер: 0115U004731

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-11-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Синтез гетероциклічних сполук на основі N-ацетил-1,4-хінонімінів.

Початок етапу: 09.2018

Закінчення етапу: 06.2019

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): 2201160

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 23.5

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез гетероциклічних сполук на основі N-заміщених 1,4-хінонімінів.

Назва роботи англійською:

Synthesis of heterocyclic compounds on the basis of N-substituted 1,4-quinoneimines.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: незаміщені та галогензаміщені у хіноїдному ядрі N-ацил(ацетил)-1,4-бензохінон-моноіміни. Мета дослідження: синтез нових гетероциклічних потенційно біологічно активних сполук на основі N-ацил(ацетил)-1,4-бензохінонмоноімінів, встановлення закономірностей роданування, бромування N- ацил(ацетил)-1,4-бензохінонмоноімінів, реакції N-ацил-1,4-бензохінонмоноімінів з єнамінами. Методи дослідження: органічний синтез, фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук: ІЧ-, ЯМР 1Н, ЯМР 13С спектроскопія, елементний аналіз, рентгеноструктурний аналіз, тонкошарова та колонкова хроматографія. Теоретичні і практичні результати: синтезовано нові гетероциклічні сполуки на основі N- N-ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів. Доведено їх будову за результатами спектральних (ІЧ, ПМР, ЯМР 13С) даних і даних елементного аналізу. В результаті роданування N-ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів встановлено, що напрямок реакції залежить від величини енергії НСМО вихідного хінонмоноіміна - для хінонмоноімінов з низькою енергією НСМО 1,4-приєднання йде атомом сульфуру роданід-іона з орбітальним контролем, для хінонмоноімінов з високою енергією НСМО - атомом нітрогену з зарядовим контролем. В результаті дії брому на галогенвмісні N-ацетил-1,4-бензохінонмоноіміни, що мають одне вільне положення 3 або 5 хіноїдного ядра, отримані 6-гідрокси-2-метил(арил)-1,3-бензоксазоли, що є досить простим методом синтезу останніх. Ефективність впровадження: гетероциклічні сполуки на основі N-ацил(ацетил)-1,4-бензохінонмоноімінів є потенційними біологічно активними сполуками і можуть використовуваться в якості лікарських препаратів, пестицидів. Сфера (галузь) застосування: в загальних та спеціальних курсах органічної хімії у класичних університетах. Серед отриманих продуктів можна вести пошук нових лікарських препаратів.

Реферат англійською:

Object of research: unsubstituted and halogensubstituted in the quinoid ring N- acyl(acety)l -1,4-benzoquinoneimines. Objective of research: to find the rules of the influence of the steric and donor-acceptor properties of the substituents near the nitrogen atom in N acyl(acetyl) 1,4-benzoquinonemjnoimines on their reactivity to nucleophiles, and also the synthesis of new heterocyclic potentially bioactive compounds on their basis. Research methods: organic synthesis, physical and chemical methods for the investigation of organic compounds: IR, NMR 1H, NMR 13C spectroscopy, elemental analysis, X-ray diffraction analysis, thin layer and column chromatography. Theoretical and practical results: new heterocyclic compounds on the basis of N-acyl((acetyl) -1,4-benzoquinoniminoimines were synthesized. Their structures were proved by the spectral (IR, PMR, NMR 13C) data and elemental analysis. In the interaction of N -acetyl-1,4-benzoquinone monoimin with potassium rhodanite, depending on the energy of the LUMO of the original quinone monoimin, benzo [d] [1,3] oxathiol-2-ones and benzo [d] oxazol-2 (3H) - derivatives were obtained thiones. At the first stage of the reaction, the high value of the energy of the LUMO promotes the addition of rodanide ion to the nitrogen atom, the low value to the addition by the sulfur atom.. As a result of the action of bromine on the halogen-containing N-acetyl -1,4-benzoquinoniminoimines having one free position of 3 or 5 of the quinidic nucleus, 6-hydroxy-2-methyl(aryl)-1,3-benzoxazoles are obtained, which is quite a simple method of synthesis of the latter. Efficiency of introduction: heterocyclic compounds based on N-acyl-1,4-benzoquinonmonoimines are potential biologically active compounds and can be used as drugs, pesticides. Application area: in the general and special courses of organic chemistry in classical universities. The products obtained in this work can be tested as new drugs.

Індекс УДК:547, 547.567.5; 547.411

Коди тематичних рубрик: 31.21

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: Нові гетероциклічні сполуки на основі N-ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів.

Назва НТП англійською: New of heterocyclic compounds on basis of N-acetyl-1,4-benzoquinoneimines.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження і розробки в галузі природничих та технічних наук.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезовано нові гетероциклічні сполуки на основі N-ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів. В результаті роданування встановлено, що напрямок реакції залежить від величини енергії НСМО вихідного хінонмоноіміна - для хінонмоноімінів з низькою енергією НСМО 1,4-приєднання йде атомом сульфуру роданід-іона з орбітальним контролем, для хінонмоноімінів з високою енергією НСМО - атомом нітрогену з зарядовим контролем. Їх будову доведено за результатами спектральних (ІЧ, ПМР, ЯМР 13С) даних і даних елементного аналізу. В результаті дії брому на галогенвмісні N-ацетил-1,4-бензохінонмоноіміни, що мають одне вільне положення 3 або 5 хіноїдного ядра, отримані 6-гідрокси-2-метил(арил)-1,3-бензоксазоли, що є досить простим методом синтезу останніх. В результаті реакції з єнамінами отримано похідні бензофурану. Вивчено ймовірні механізми даної реакції. Також досліджено вплив розчинників різної природи на перебіг реакції циклізації та з'ясовано, що єдиними гетероциклічними продуктами є похідні бензофурану. Отримано гетероциклічні продукти, які є потенційними біологічно активними сполуками.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

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

Активированная стерически напряженная связь C = N в замещенных п-хинононо- и дииминах. XVI. Закономерности в ее проявлении / А. П. Авдеенко, С. А. Коновалова, С. В. Шишкина [и др.] // Журнал органической химии. – 2018. – Т. 54, Вып. 1. – С. 62–77.

Активированная стерически напряженная связь C = N в замещенных п-хинононо- и дииминах. XVII. Циклогексеновые полигалогеновые структуры на основе N-арилсульфонил-п-хинониминов / А. П. Авдеенко, С. А. Коновалова, С. В. Шишкина [и др.] // Журнал органической химии. – 2018. – Т. 54, Вып. 5. – С. 671–686.

Лисенко О.М. Синтез і біологічна активність 1,3-бензоксатіол-2-ону / Лисенко О.М., Коновалова С.О., Авдєєнко А.П. // X Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські питання-2018». - Харьків-2018. - С.112-113.

Лисенко О.М. Синтез N-ариламінокарбоніл-1,4-бензохінонмоноімінів / Лисенко О.М., Коновалова С.О., Авдєєнко А.П. // Тези доповідей II Всеукраїнської наукової конференції. Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи. Збірник матеріалів конференції - Житомир-2018. - С.284-285.

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

