Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0405U004411

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-11-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Грищук Лідія Володимирівна

2. Grishchuk Lidiya Vladimirovna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.03

Назва наукової спеціальності: Органічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 28-10-2005

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова. Наукова частина

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: 65082. м. Одеса, вул. Дворянська, 2

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 41.219.02

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21.19

Тема дисертації:

1. 3,4,6-Тризаміщені 1,2-дигідрохінолін-2-они і похідні на їх основі: синтез, структура, властивості

2. 3,4,6-Trisubstituted 1,2-dihydroquiniline-2-ones and derivatives on their base: synthesis, strucure, properties

Реферат/анотація:

1. Об'єкт дослідження: 3,4,6-тризаміщені 1,2-дигідро-хінолін-2-они і гетероциклічні системи на їх основі – азолохіноліни, методи синтезу, властивості. Мета дослідження: розробка методів синтезу нових похідних 1,2-дигідрохінолін-2-ону, 1,2,4-триазоло-, тетразоло[a]-, 1,2,3-триазоло- і імідазо[b]хінолінів, вивчення їх будови, хімічних властивостей і біологічної дії. Методи дослідження і апаратура: органічний синтез, тонкошарова хроматографія, елементний аналіз, ІЧ, ЯМР та УФ спектроскопія, мас-спектрометрія, рентгеноструктурний аналіз, розрахунки методами молекулярної механіки та квантової хімії за допомогою програми "Hyper Chem 6.0" (trial version, http:// www.hyper.com), PASS iQSARаналізи. Теоретичні результати та їх новизна: Вперше показано, що взаємодія похідних 5-R-2-хлороацетиламінобензофенонів з первинними і вторинними амінами, а також нітритами, ціанідами і роданідами калію(натрію) не обмежується нуклеофільним заміщенням атома галогену у аліфатичній частині вихідної молекули, а завершується утворенням 3,4,6-тризаміщених 1,2-дигідрохінолін-2-онів. Встановлено, що гетероциклізація 2-гідразино-3-нітрохінолінів дією азотистої кислоти відбувається лише за одним з двох альтернативних маршрутів: з утворенням

тетразоло-[1,5-a]хінолінів, а не фуроксано-[3,4-b]хінолінів, що визначається термодинамікою реакції. Знайдено, що при нагріванні розчинів 2-(6-R-3-нітро-4-фенілхінолін-2-іл-сульфаніл)-1-фенілетанонів у ДМФА реалізується нова реакція – в результаті екструзії атома сірки і перегрупування замісника утворюються 2-(6-R-3-нітро-4-феніл-1H-хінолін-2-іліден)-1-фенілетанони. Практичні результати і новизна: Розроблено зручні методи отримання раніше не описаних 3,4,6-тризаміщених 1,2-дигідро-хінолін-2-онів, їх 2-хлоро-, 2-меркапто-, 2-гідразино- і 2,3-діамінопохідних та хінолінів з анельованими ядрами азолів на їх основі. Розроблено оригінальний підхід до синтезу 2-(6-R-3-нітро-4-феніл-1H-хінолін-2-іліден)-1-фенілетанонів. Показано, що похідні 3-нітро-2-хлорохіноліну і 2,3-діамінохіноліну є зручними синтонами для одержання 1,2,3-триазоло[4,5-b]- і імідазо[4,5-b]хінолінів. Серед синтезованих вперше похідних хіноліну виявлено речовини з високою протисудомною і антибактеріальною активністю, для досліджених сполук встановлено зв'язок будова-активність. За результатами аналізів PASS і QSAR визначені потенційні області практичного використання отриманих сполук для пошуку в їхньому ряді фізіологічно активних речовин. Предмет та ступінь впровадження: публікації, доповіді на наукових конференціях, використання результатів роботи у науково-педагогічній практиці ВУЗів та НДІ України. Ефективність впровадження полягає в розробці методів синтезу нових 3,4,6-тризаміщених 1,2-дигідрохінолін-2-онів та хінолінів з анельованими ядрами азолів на їх основі, оцінці перспективності пошуку нових протисудомних та антибактеріальних препаратів в їхньому ряді. Сфера використання: хімія, біологія, медицина.

2. Object of investigation: 3,4,6-Trisubstituted 1,2-di-hydroquinoline-2-ones and heterocyclic systems on their base – azoloquinolines, synthetic methods, properties. Aim of investigation: development of synthetic methods for the novel 1,2-dihydroquinoline-2-one derivatives, as well as, for 1,2,4-triazolo-, tetrazolo[a]-, 1,2,3-triazolo- and imidazo[b]quinolines, study of their structures, che-mical properties and biological action. Methods of investigation and equipment: organic synthesis, thin-layer chromatography, elemental analysis, IR, PMR and UV spectroscopy, mass-spectrometry, X-ray analysis of structure, computing by methods of molecular mechanics and quantum chemistry using programm "Hyper Chem 6.0" (trial version, http: // www.hyper.com), PASS, and QSAR analyses. Theoretical results and their novelty: For the first time, it was demonstrated that interaction of 5-R-2-chloroacetylaminobenzophenones derivatives with primary and secondary amines, as well as, with potas-sium (sodium) nitrates, cyanides, rodanides had not been limited by nucleophylic substitution of a halogene atom in alyphatic moiety of initial molecule, but resulted in 3,4,6-trisubstituted 1,2-dihydroquinoline-2-ones. It was established that heterocyclization of 2-hydrazino-3-nitroquinolines after effect of nitrous acid proceeded only by one of two alternative pathways: with formation of tetrazolo[1,5-a]quinolines, but not furoxano[3,4-b]-quinolines, what had been stipulated by reaction thermodynamics. It was discovered that the novel reac-tion had been proceed upon the heating of 2-(6-R-3-nitro-4-phenylquinoline-2-yl-sulfanyl)-1-phenylethanones so-lutions in DMF – 2-(6-R-3-nitro-4-phenyl-1H-quinoline-2-ylidene)-1-phenylethanones had been formed as a result of sulfur atom extrusion and substituent rear-rangement. Practical results and their novelty: conveni-ent methods of obtaining of not previously described 3,4,6-trisubstituted 1,2-dihydroquinoline-2-ones, as well as, their 2-chloro-, 2-mercapto-, 2-hydrazino- and 2,3-diaminoderivatives and quinolines with annelated azole cores on their base, were developed. It was developed the original approach to 2-(6-R-3-nitro-4-phenyl-1H-quinoline-2-ylidene)-1-phenylethanones synthesis. It was shown that 3-nitro-2-chloroquinoline and 2,3-diamino-quinoline derivatives had been convenient synthones for obtaining of 1,2,3-triazolo[4,5-b]- and imidazo[4,5-b]-quinolines. Among the denovo synthesized quinoline derivatives were identified the substances with a high anticonvulsive and antibacterial activity, for the studied compounds, structure-activity relationship was revealed. Resulting from PASS and QSAR analyses, potential fields for the use of obtained compounds were defined for the search for novel physiologically active substances in this series. Subject and the degree of introduction: publications, reports at scientific conferences, application of the work in scientific-pedagogical practice in High-schools and Investigation Institutes of Ukraine. Efficiency of introduction consists in development of synthetic methods of 3,4,6-trisubstituted 1,2-dihydroqui-noline-2-ones and quinolines with annelated azole cores on their base, as well as, in estimation of prospectivity of search for novel anticonvulsive and antibacterial agents in their series. Sphere of use: chemistry, biology, medicine.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Іванов Едуард Іванович
2. Ivanov Eduard Ivanovych

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Десенко Сергій Михайлович
2. Десенко Сергій Михайлович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ішков Юрій Васильович
2. Ішков Юрій Васильович

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради — Андронаті Сергій Андрійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні — Андронаті Сергій Андрійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності — Юрченко Т.А.