Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U101537

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ткаченко Ірина Григорівна

2. Tkachenko Iryna H

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: 29-04-2021

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Товариство з обмеженою відповідальністю "Фармацевтична компанія "Здоров'я"

Код за ЄДРПОУ: 31437750

Місцезнаходження: вул. Шевченко, буд. 22, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Держадміністрація

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61072, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Нові дигідропохідні азолопіримідинів на основі аліфатичних карбонільних сполук

2. New dihydro derivatives of azolopyrimidines based on aliphatic carbonyl compounds

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено розробці методик синтезу частково гідрованих аліфатичнозаміщених азолопіримідинів з вузловим атомом азоту з низькою молекулярною масою. Трикомпонентною конденсацією 3-аміно-1,2,4-триазолу та його похідних, 5-аміно-1,2,3-триазолу-4-карбоксаміду або 5 аміно-2Н-тетразолу з аліфатичними альдегідами та п-дикарбонільними метиленактивними сполуками у водному середовищі отримано нові 4,7-дигідро-1,2,4-триазоло, 4,7-дигідро-1,2,3-триазоло та 4,7-дигідротетразоло[1,5-а]піримідини, будова яких підтверджена спектральними методами аналізу, зокрема, рентгеноструктурними дослідженнями. Встановлено, що циклоконденсація аміноазолів з оцтовим альдегідом та трифлуорацетооцтовим естером приводить до утворення суміші стійких діастереомерів 5-гідроксизаміщених 4,5,6,7-тетрагідроазоло[1,5-а]піримідинів без елімінування напівамінальної гідроксигрупи. За допомогою спектральних методів аналізу було встановлено їх просторову будову. Усі синтези проведено у водному середовищі без застосування каталізатору, що відповідає принципам «зеленої

хімії». Встановлено, що взаємодія 3-аміно-5-метилпіразолу з ацетилацетоном та аліфатичними альдегідами у співвідношенні 2:2:1, відповідно, веде до утворення біс-похідних піразоло[1,5-a]піримідину, замість очікуваних 4,7-дигідропохідних піразолопіримідину. Бромування похідних 4,7-дигідро-1,2,4-триазоло[1,5-a]піримідину в оцтовій кислоті дозволило отримати 5-бромометилпохідні зі збереженням дигідроструктури циклу, які надалі були використані як вихідні реагенти в реакціях нуклеофільного заміщення з амінами. Окремі представники серед нових синтезованих частково гідрованих азолопіримідинів виявили протимікробну, протигрибкову, антиоксидантну активність при дослідженні біологічної активності in vitro.

2. Thesis describes the Authors' development of methods for the synthesis of low molecular weight partially hydrogenated aliphatic substituted azolopyrimidines with a nodular nitrogen atom. The novel multicomponent approach to the synthesis of partially hydrogenated azolopyrimidines containing exclusively aliphatic substituents in an aqueous medium has been proposed. This approach is based on the theoretical principles and the requirements for potential drug-like compounds, analysis of known methods for the synthesis of aryl-substituted azolopyrimidine systems, involving priority areas of "green chemistry" (use of non-toxic solvents). Three-component condensation of 3-amino-1,2,4-triazole and its derivatives with aliphatic aldehydes and □-dicarbonyl methylene-active compounds in water yielded 4,7-dihydro-1,2,4-triazolo[1,5-a]pyrimidines. Formaldehyde was introduced into the reaction in the form of paraformaldehyde, which proved to be more convenient from a practical point of view, compared with a solution of formalin, and at the same time had almost no effect on the reaction time. Introduction of other binucleophiles into three-component condensation with aliphatic aldehydes and 1,3-dicarbonyl compounds, namely 5-amino-2H-tetrazole and 1,2,3-triazole-4-carboxamide, in an aqueous medium without any catalyst under microwave or thermal activation also led to the selective formation of 4,7-dihydrotetrazolo(-1,2,3-triazolo)[1,5-a]pyrimidines. The chemical structure of these compounds was confirmed by spectral methods of analysis and by X-ray diffraction studies. Cyclocondensation of aminoazoles with acetaldehyde and trifluoroacetoacetic ester results in formation the mixture of two diastereomers of the corresponding stable 5-hydroxy-substituted 4,5,6,7-tetrahydroazolo[1,5-a]pyrimidines without elimination of their hydroxy-group. The dehydration of the tetrahydroderivatives obtained in more severe conditions took place. Their spatial structure was established using spectral analysis methods. The compounds were obtained in an aqueous medium in catalyst-free conditions. Their synthesis satisfies the principles of "green chemistry". It was found that the three-component condensation of 5-amino-1,2,3-triazole-4-carboxamide with malononitrile and cyclohexanone led to the formation of a spiro-derivative of 1,2,3-triazolo[1,5-a]pyrimidine. It was shown that the interaction of 3-amino-1,2,4-triazole and 5-amino-1,2,3-triazole-4-carboxamide with cyclohexanone and malononitrile have the opposite direction of the formation of the pyrimidine ring; this phenomenon is explained by the rearrangement of Dimroth at one of the stages of cyclocondensation with the participation of 5-amino-1,2,3-triazole-4-carboxamide.

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. Комихов Сергій Олександрович

2. Komykhov Sergiy O

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Земляна Наталя Ігорівна

2. Zemliana Natalia I.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шемчук Леонід Антонович

2. Shemchuk Leonid A

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. Колос Надія Миколаївна

2. Kolos Nadia M

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Дорошенко Андрій Олегович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Дорошенко Андрій Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.