Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Image not found or type unknow

Державний обліковий номер: 0822U100112

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-01-2022

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коломойцев Олексій Олегович

2. Kolomoitsev Oleksii Olehovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 29-12-2021

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: 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

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 64.051.043

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: 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

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Хімія 2,4-дизаміщених похідних 5-формілтіазолу

2. Chemistry of 5-formylthiazole 2,4-disubstituted derivatives

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена ряду 2,4-дизаміщених похідних 5-формілтіазолу. Хоча на сьогодні існує велика кількість досліджень, що присвячено хімії тіазолу, інтерес до даних сполук не зменшується. Це пов'язано з їх різноманітними фізико-хімічними, спектральними, біологічними властивостями. Дані сполуки знаходять своє місце в хімії, біології, фармації та матеріалознавстві як предмет з практичним застосуванням в багатьох сферах науки та техніки. Тіазоловмісні сполуки досліджуються ще з XIX століття, але, з часом інтерес до похідних формілтіазолу лише зростає. Таким чином, було відкрито безліч цікавих властивостей похідних 5-формілтіазолу як з наукової, так і з практичної точок зору. Такі похідні, як α,β-ненасичені системи на основі 5-формілтіазолу, викликають зацікавленість завдяки наявності енонового фрагменту, що входить до їх складу. Підходи до модифікації α,β-ненасичених систем із одержанням діазагетероциклічних сполук, що містять дві та більше функцій у своєму складі, значно збільшують варіативність функціоналізації тіазоловмісних сполук. Наприклад, так одержують піримідини, 1H-імідазоли, 1H-піразоліни, 1H-бензімідазоли з їх цікавими фізико-хімічними, спектральними, оптичними та біологічними властивостями,

що відкривають цілу низку засобів до їх практичного застосування. Дисертаційна робота присвячена дослідженню хімічної природи похідних тіазолу, а саме фізико-хімічних та спектральних властивостей груп тіазольних аналогів: 2,4-дизаміщених 4-(1,3-тіазол-5-іл)бут-3-ен-2-онів, 5-арил-1-(2- діалкіламіно-4-хлортіазол-5-іл)пента-1,4-дієн-3-онів, 2-діалкіламіно-4-хлор-5- [2-(5-арил-4,5-дигідро-1Н-піразол-3-іл)вініл]тіазолів на їх основі та діазагетероциклічних сполук ([4-(4-бромфеніл)-6-тіазол-5-іл-піримідин-2-іл]метиламінів та 5-(1Н-бензімідазол-2-іл)тіазолу). Перетворення за карбонільною групою, що входить до складу 5-формілтіазолів, шляхом реакцій конденсації Кляйзена-Шмідта, а також модифікованих підходів Хорнера-Уодсворта-Еммонса та Віттіга було одержано нові □,□-ненасичені кетони – 4-(1,3-тіазол-5-іл)бут-3-ен-2-они. Функціоналізація положень 2 і 4 тіазольного циклу дозволила дослідити вплив замісників в даних положеннях на властивості одержуваних сполук. Карбонільний компонент 4-(1,3-тіазол-5-іл)бут-3-ен-2-онів через реакцію Кляйзена-Шмідта з ароматичними альдегідами дав можливість одержати нові асиметричні дієнонові сполуки – 5-арил-1-(2-діалкіламіно-4-хлортіазол-5- іл)пента-1,4-дієн-3-они. Їхні властивості було досліджено введенням даних сполук у циклоконденсацію з гідразином, що також дало змогу одержати єдиний з двох можливих ізомерних продуктів даної взаємодії – 2-діалкіламіно-4-хлор-5- [2-(5-арил-4,5-дигідро-1Н-піразол-3-іл)вініл]тіазолів. Одержання одного ізомеру похідних 1Н-піразоліну було підтверджено спектральними методами дослідження та квантово-хімічними розрахунками. Вплив замісників в положеннях 2 і 4 тіазольного циклу було вивчено для рядів 2,4-дизаміщених похідних 5-формілтіазолу: 4-(1,3-тіазол-5-іл)бут-3-ен-2- онів, 5-арил-1-(2-діалкіламіно-4-хлортіазол-5-іл)пента-1,4-дієн-3-онів та 2-діалкіламіно-4-хлор-5-[2-(5-арил-4,5-дигідро-1Н-піразол-3-іл)вініл]тіазолів. Особливе місце в роботі займає одержання тіазольних аналогів халкону, що було реалізовано шляхом взаємодії 5-формілтіазолу з 4-бромацетофеноном. На даному етапі було розроблено метод бромування □,□-ненасичених систем, які містять тіазольне ядро з атомами Гідрогену в положеннях 2 і 4, в яких практично виключено утворення побічних продуктів галогенування або гідрогалогенування, а вихід цільових продуктів наближається до кількісного. Також, було запропоновано □,□-ненасичений кетон на основі 5-формілтіазолу у якості агенту для реакції гетероароматизації з різними 1,3-бінуклеофілами. В результаті утворюються нові тіазоловмісні 1,3-діазагетероциклічні сполуки. У якості таких бінуклеофілів використано □-аміноамідини, для одержання яких запропоновано зручний синтетичний підхід.

2. The dissertation is devoted to a series of 5-formylthiazole 2,4-disubstituted derivatives. Although to date, the study on the chemistry of thiazole, interest in these compounds is not declining. This is due to their physico-chemical, spectral, biological properties. These compounds have their place in chemistry, biology, pharmacy and materials science as a subject of practical application in many fields of science and technology. Thiazole-containing compounds have been studied since the 19th century, but over time, interest in formylthiazole derivatives has only grown. Thus, many interesting properties of 5-formylthiazole derivatives have been discovered from both scientific and practical points of view. Derivatives such as □,□-unsaturated systems based on 5-formylthiazole, are of interest due to the presence of an enone fragment that is part of them. Approaches to the modification of □,□-unsaturated systems to obtain diazaheterocyclic compounds containing two or more functions in their composition, significantly increase the variability of the functionalization of thiazole-containing compounds. For example, pyrimidines, 1H-imidazoles, 1H-pyrazolines, 1H-benzimidazoles with their interesting physicochemical, spectral, optical and biological properties are obtained, that opens a series of ways for their practical application. The thesis is devoted to the study of the chemical nature of thiazole derivatives, namely the physicochemical and spectral properties of groups of thiazole analogues: 2,4-disubstituted 4-(1,3-thiazol-5-yl)but-3-en-2-ones, 5-aryl-1-(2-dialkylamino-4- chlorothiazol-5-yl)penta-1,4-diene-3-ones, 2-dialkylamino-4-chloro-5-[2-(5-aryl-4,5- dihydro-1H-pyrazol-3-yl)vinyl]thiazoles based on them and diazaheterocyclic compounds ([4-(4-bromophenyl)-6-thiazol-5-yl-pyrimidin-2-yl]methylamines and 5-1H-benzimidazol-2-yl)thiazole). Transformation by the carbonyl group that is a structural fragment of 5-formylthiazoles, by Claisen-Schmidt condensation reactions, as well as modified Horner-Wadsworth-Emmons and Wittig approaches, novel □,□-unsaturated ketones – 4-(1,3-thiazol-5-yl)but-3-ene-2-ones were obtained. Functionalization of positions 2 and 4 of the thiazole cycle allowed to investigate the effect of substituents in these positions on the properties of the obtained compounds.

The carbonyl component of 4-(1,3-thiazol-5-yl)but-3-en-2-ones through the Claisen-Schmidt reaction with aromatic aldehydes made it possible to obtain novel asymmetric dienone compounds – 5-aryl-1-(2-dialkylamino-4-chlorothiazol-5- yl)penta-1,4-diene-3-ones. Their properties were investigated by introducing these compounds into cyclocondensation with hydrazine, which also made it possible to obtain one of the two possible isomeric products of this interaction – 2-dialkylamino- 4-chloro-5-[2-(5-aryl-4,5-dihydro-1H-pyrazol-3-yl)vinyl]thiazoles. The obtaining of one isomer of 1H-pyrazoline derivatives was confirmed by spectral research methods and quantum chemical calculations. The effect of substituents at positions 2 and 4 of the thiazole cycle was studied for a series of 2,4-disubstituted derivatives of 5-formylthiazole: 4-(1,3-thiazol-5- yl)but-3-en-2-ones, 5-aryl-1-(2-dialkylamino-4-chlorothiazol-5-yl)penta-1,4-diene-3- ones and 2-dialkylamino-4-chloro-5-[2-(5-aryl-4,5-dihydro-1H-pyrazol-3-yl)vinyl] thiazoles. A special place in the work is devoted to obtaining of thiazole analogues of chalcone, which was performed by the interaction of 5-formylthiazole with 4-bromoacetophenone. At this stage, a method of bromination of □,□-unsaturated systems containing thiazole nucleus with hydrogen atoms in positions 2 and 4 was developed, in which the formation of halogenation or hydrohalogenation by-products is practically eliminated and the yield of target compounds is close to quantitative. Also, □,□-unsaturated ketone based on 5-formylthiazole has been proposed as an agent for heteroaromatization reactions with various 1,3-binucleophiles. As a result, novel thiazole-containing 1,3-diazaheterocyclic compounds are formed. As such binucleophiles □-aminoamidines were used, for which a convenient synthetic approach has been proposed.

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. Котляр Володимир Миколайович

2. Kotliar Volodymyr M

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. Обушак Микола Дмитрович
2. Obushak Mykola Dmytrovych

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. Богза Сергій Леонідович
2. Bohza Serhii Leonidovych

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коваленко Сергій Миколайович

2. Kovalenko Serhii Mykolaiovych

Кваліфікація: д. х. н., 15.00.02

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 Nadiia Mykolaivna

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

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Кириченко Олександр Васильович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Кириченко Олександр Васильович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.