Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0407U001666

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-04-2007

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пархоменко Олексій Олександрович
2. Parkhomenko Oleksiy Oleksandrovych

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: 30-03-2007

Спеціальність за освітою: 7.110201

Місце роботи здобувача: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: 61002, м.Харків, вул.Пушкінська, 53

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я

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, 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: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: 61002, м.Харків, вул.Пушкінська, 53

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21.17

Тема дисертації:

1. Використання мультикомпонентних та доміно-реакцій для синтезу похідних 2-тіоксо-2,3-дигідро[1,3]тіазолів

2. Uses of multicomponent and domino-reactions for synthesis of derivatives of 2-thioxo-2,3-dihydro[1,3]thiazoles

Реферат/анотація:

1. Об’єкти дослідження: Трикомпонентна конденсація органічних ізотіоціанатів, сірки та ціанометиленактивних сполук. Мета: Проведення дослідження синтетичних можливостей мультикомпонентної конденсації органічних ізотіоціанатів, сірки та ціанометиленактивних сполук. Методи: Син-тез похідних 2-тіоксо-2,3-дигідро[1,3]тіазолів; синтез комбінаторних бібліотек похідних 2-тіоксо-2,3-дигідро[1,3]тіазолів; аналіз структурних особливостей одержаних речовин за допомогою сучасних фізико-хімічних методів дослідження: спектроскопії ЯМР, хромато-мас-спектрометрії, рентгеноструктурного та елементного аналізів; комп’ютерне прогнозування спектру біологічної активності бібліотек сполук на основі розроблених темплейтів з використанням комп’ютерної програми PASS, проведення первинного біологічного скринінгу синтезованих сполук. Вивчено: Досліджені можливості хімічних перетворень трикомпонентної реакції органічних ізотіоціанатів, сірки та ціанометиленактивних сполук при введенні в реакцію речовин бідентатної хімічноїприроди, речовин з додатковими хімічно активними угрупуваннями та

додаткових компонентів. Синтезовані нові, не описані в літературі речовини. Деякі з них мають фрагме-нти двох нових, невідомих раніше конденсованих гетероцик-лічних систем. Досліджено нові мультикомпонентні та тандемні перетворення, а також нові однореакторні процеси, що є прогресивним кроком для створення методології і технології синтезу речовин даної групи. У результаті проведених досліджень синтезовано 144 неописаних у літературі сполук, структура яких підтверджена даними сучасних фізико-хімічних методів аналізу (1H, 13C ЯМР-спектроскопії, елемен-тного та рентгеноструктурного аналізу, мас-спектрометрії). За допомогою комп'ютерної програми PASS було проведено прогнозування біологічної активності для систематичних рядів вивчених речовин. Аналіз отриманих результатів дозволив встановити деякі закономірності між їх будовою та біологічною дією. Результати біологічних досліджень довели наявність вираженої антимікробної дії деяких синтезованихречовин. Ступіньвпровадження: Отримані результати можуть бути використані для синтезу масивів речовин на основі синтезованих сполук для розширеного пошуку біологічно-активних речовин та оптимізації фізико-хімічних параметрів речовин зі вже відомими біологічними властивостями шляхом синтезу комбінаторних бібліотек на основі розроблених темплейтів.

2. Investigation objects: three-component condensation of CH-acidic nitriles, organic isothiocyanates and sulphur. Purpose: research of three-component condensation of CH-acidic nitriles, organic isothiocyanates and sulphur while using bifunctional re-agents and introducing additional components to reactionary medium. Methods: The synthesys of 2-thioxo-2,3-dihydro[1,3] thiazole derivatives, development of combinatorial libraries technology based on the obtained compounds, computer prog-noses of biological activity of the combinatorial libraries and biological screening for anti-microbial activity of the obtained compounds. Has been established: Double heterocyclization with cyanoacetamides, sulphur and isothiocyanates using re-agents possessing double cyanomethylene-active function has been studied. It has been proved that these compounds are really easy-forming and the process accomplishment does not require extra conditions for activating the second cyanoacetamide cen-tre. It has been determined that 2-carbometh¬oxiphen¬yliso¬thio¬cya¬nate and its derivatives' joining the reaction entails a dom-ino-reaction with closure of the two heterocycles at once and excreting agents of 1-thi¬oxo¬[1,3]¬thiazolo¬[3,4-?]¬qui¬na¬zo¬li¬ne-5(4H)-one heterocyclic system which had not been described yet. Malononitrile condensation with isothiocyanates was per-formed followed by excretion of derivatives of 4,6-diamino-2-thioxo-1,2-dihydro-3,5-piridine¬carbo¬di¬nit¬rile. In case of 2-carbomethoxiphenylthiocyanate joining the reaction, thermal cyclization becomes possible with excreting an agent of 3-amino-6-oxo-1-thioxo-5,6-dihydro-1H-pirido[1,2-?]-quinazoline-2,4-dicarbonitrile hete¬ro¬cycle which had not been described yet. Synthesis of novel heterocyclic systems has been performed due to combining biofunctionalities possessed by de-rivatives of methylene-active and isothiocyanatic nature, and on account of introducing additional components to reactionary medium. Degree of application: The results obtained can be used for newcombinatorial libraries syntheses which can use in drug research and development.

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. Коваленко С.М.

2. Kovalenko S.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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Колос Н.М.

2. Колос Н.М.

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. Ліпсон В.В.

2. Ліпсон В.В.

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 Орлов В.Д.

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Орлов В.Д.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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