Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U004888

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-11-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Соломянний Роман Миколайович
2. Solomiannyi Roman M.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.10

Назва наукової спеціальності: Біоорганічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 14-11-2019

Спеціальність за освітою: Хімічна технологія органічних речовин

Місце роботи здобувача: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, 1, м. Київ, Київська обл., 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.220.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, 1, м. Київ, Київська обл., 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, 1, м. Київ, Київська обл., 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.23

Тема дисертації:

1. Синтез біоактивних гетероциклічних сполук з сірко- та фосфоровмісними групами на основі функціоналізованих енамінів

2. Synthesis of bioactive heterocyclic compounds with sulfur and phosphorus-containing groups on the functionalized enamines basis

Реферат/анотація:

1. На основі 3-етокси-2 метилсульфонілакрилонітрилу, завдяки реакції з N-нуклеофілами, отримано ряд 4-амінопіримідинів (у т. ч. гетероконденсованих по грані а), піримідин-2,4(1H,3H)-діонів та 4-іміно-3,4-дигідропіримідин-2(1H)-онів із фармакофорною метилсульфонільною групою в положенні 5. Шляхом доміно-реакції 3-аміно-2-сульфонілакрилонітрилів із 1-ізоціанато-2-хлороетаном або 1-ізоціанато-3-хлоропропаном синтезовано 2,6-дигідроімідазо[1,2-с]піримідин-5(3H)-они та 2,3,4,7-тетрагідро-6H-піримідо[1,6-а]піримідин-6-они із метил- та фенілсульфонільною групами в положеннях, відповідно, 8 та 9; у т. ч. сполуки із гідроксиетильним фрагментом – аналоги ациклонуклеозидів. Функціоналізовані піроли, синтезовані із 3-аміно-2-сульфоніл(фосфорил/фосфонато)акрилонітрилів, використано для одержання 5H-

піроло[3,2-d]піримідинів із групами PhSO2–, Ph2P(O)–, (EtO)2P(O)– в положенні 7, а також для синтезу 7-фосфонато-1H-1,3,4,5-тетрагідропіроло[3,2-d]піримідин-2-онів. На основі хлорангідридів гетероароматичних карбонових кислот одержано (5-(2-ацилгідразино)-2-(п-толіл)-1,3-оксазол-4-іл)фосфонатів та продуктів їх рециклізації під дією гідразину – (5-гетарил-1,3,4-оксадіазол-2-іл)(аміно)метилфосфонових кислот. Розроблено підхід до синтезу (2-арил-5-хлоро(арилтіо)-1,3-тіазол-4-іл)тіофосфонатів на основі 1-ациламіно-2,2-дихлоровінілфосфонатів із застосуванням реагента Лоусона. Для одержання та доказу будови вказаних речовин використано хімічний синтез, ІЧ- та ЯМР-спектроскопію (1H, 13C, 31P), хромато-мас-спектрометрію, рентгеноструктурне дослідження, елементний аналіз. В результаті біологічного скринінгу in vitro знайдено похідні 8-сульфоніл-2,6-дигідроімідазо[1,2-c]піримідин-5(3H)-ону зі значною активністю та селективністю по відношенню до вірусу папіломи людини та ВК вірусу, похідну 9-сульфоніл-2,3,4,7-тетрагідро-6H-піримідо[1,6-a]піримідин-6-ону з активністю проти ВК вірусу; також виявлено активність похідних піроло[3,2-d]піримідину із сульфонільною та фосфонатною групою в положенні 7. Показано рістстимулюючу активність для широкого кола 8-сульфоніл-2,6-дигідроімідазо[1,2-c]піримідин-5(3H)-онів та 9-сульфоніл-2,3,4,7-тетрагідро-6H-піримідо[1,6-a]піримідин-6-он, для деяких похідних піроло[3,2-d]піримідину із фосфонатною групою. Сфера використання – біоорганічна хімія.

2. Due to the interaction of 3-ethoxy-2-methylsulfonylacrylonitrile with N-nucleophiles a number of 4-aminopyrimidines (including heteroannulated by edge a), pyrimidine-2,4(1H,3H)-diones and 4-imino-3,4-dihydropyrimidin-2(1H)-ones with the pharmacophore methylsulfonyl group at position 5 was obtained. By the domino reaction of 3-amino-2-sulfonylacrylonitriles with 2-chloro-1-isocyanatoethane or 3-chloro-1-isocyanatopropane 8-methyl(phenyl)sulfonyl-2,6-dihydroimidazo[1,2-c]pyrimidin-5(3H)-ones and 9-methyl(phenyl)sulfonyl-2,3,4,7-tetrahydro-6H-pyrimido[1,6-a]pyrimidin-6-ones, including acyclonucleosides analogues – compounds with a hydroxyethyl fragment, were synthesized. Functionalized pyrrole (synthesized from 3-amino-2-sulfonyl(phosphoryl/phosphonate)acrylonitrile) have been used for obtaining of 5H-pyrrolo[3,2-d]pyrimidines with PhSO2–, Ph2P(O)–, (EtO)2P(O)– groups in position 7, as well as for the synthesis of 7-phosphonato-1H-1,3,4,5-tetrahydropyrrolo[3,2-d]pyrimidin-2-ones. Heteroaromatic carboxylic acid chlorhydrides have been used to obtain (5-(2-acylhydrazino)-2-(p-tolyl)-1,3-oxazol-4-yl)phosphonates and their products of recyclization under the hydrazine action – (5-hetaryl-1,3,4-oxadiazol-2-yl)(amino)methylphosphonic acids. An approach to the (2-aryl-5-chloro(arylthio)-1,3-thiazol-4-yl)thiophosphonates synthesis based on 1-acylamino-2,2-dichlorovinylphosphonates using the Lawson reagent was developed. Chemical synthesis, IR and NMR spectroscopy (1H, 13C, 31P), LC MS, X-ray, and elemental analysis were used to obtain and prove the structure of these substances. As a result of in vitro biological screening, it was found that 8-sulfonyl-2,6-dihydroimidazo[1,2-c]pyrimidin-5(3H)-one derivatives have the significant activity and selectivity to Human papilloma virus and BK virus, 9-sulfonyl-2,3,4,7-tetrahydro-6H-pyrimido[1,6-a]pyrimidin-6-one – to BK virus; also the activity of pyrrolo[3,2-d]pyrimidine derivatives with sulfonyl and phosphonate group at position 7 was found. It was found that the growth-regulating activity is inherent in many 8-methyl(phenyl)sulfonyl-2,6-dihydroimidazo[1,2-c]pyrimidine-5(3H)-ones and 9-methyl(phenyl)sulfonyl-2,3,4,7-tetrahydro-6H-pyrimido[1,6-a]pyrimidine-6-ones, and in some pyrrolo[3,2-d]pyrimidin derivatives. Scope – bioorganic chemistry.

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. Броварець Володимир Сергійович

2. Brovarets Volodymyr S.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.10

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. Богза Сергій Леонідович

2. Bogza Sergey L.

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. Горічко Мар'ян Віталійович

2. Gorichko Maryan V.

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 Вовк Андрій Іванович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Вовк Андрій Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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