Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0409U000328

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-01-2009

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Марруго Гонсалес Алонсо Хосе
2. Marrugo Gonzalez Alonso Jose

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: 16-01-2009

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

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: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: Україна, 61022, м. Харків, майдан Свободи,4

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21.19

Тема дисертації:

1. Халкони, 2-піразоліни та 2,3-дигідро-1H-1,5-бензодіазепіни, що містять 8-гідроксихіноліновий фрагмент
2. Chalcones, 2 pyrazolines, 2,3 dihydro-1H-1,5 benzodiazepines, containing 8 hydroxyquinoline fragment

Реферат:

1. Об’єкти дослідження: ?,?-ненасичені кетони, що містять 5 (8 гідроксихіноліновий) замісник, 2-піразоліни і 2,3 дигідро-1H-1,5-бензодіазепіни. Мета: одержання анало-гів халкона, що містять хелатний 8-гідроксихіноліновий фрагмент, і на їх основі похідних 2-піразоліна та 2,3-дигідро-1H-1,5-бензо[b]діазепіна та дослідження фізико-хімічних властивостей отриманих сполук. Методи: Органіч-ний синтез, спектроскопія ЯМР 1H та ІЧ, UV-VIS-спектроскопія поглинання і випромінення, елементний ана-ліз, PASS (Prediction of Activity Spectra for Substance). Нау-кова новизна: Показано, що халкони на основі 5-форміл- та 5 ацетилпохідних 8-гідроксихіноліну в умовах лужного ка-талізу мають переважну s-цис-транс-геометрію пропеноно-вого фрагменту з його анти-орієнтацією по відношенню до хінолінового фрагменту. Виявлено, що найбільш основним центром цих молекул є атом азоту гетероциклу, оцінено константи його протонування та депротонування НО-групи. Показано, що бромування єнонової системи можливе після бромування гетероциклу. Встановлено, що 5 (8 гідрокси-хіноліновий) фрагмент чинить значний батохромний та ба-тофлорний ефект, коли вводиться у 3 положення 2 піразоліну. Показано можливість

синтезу 5 (8 гідрок-сихінолінових) похідних 2,3 дигідро-1Н-1,5-бензо-діазепіну, який ускладнюється звуженням семичленного дигідродіазе-пінового циклу до п'ятичленного імідазольного. Практичне значення: Оптимізовано умови синтезу 5-форміл-8-гідроксихіноліну по реакції Реймера-Тімана. Запропоновано групу нових ???-ненасичених кетонів, що містять 8-гідроксихіноліновий фрагмент і володіють чітко вираженою хелатуючою здатністю. Розкрито можливості їхнього вико-ристання в синтезі похідних 2-піразоліну й 2,3-дигідро-1-Н-1,5-бензо[b]діазепіну, вивчені їх хромофорні й комплексо-утворюючі властивості. Представлено прогноз фармаколо-гічної активності отриманих сполук, розрахований за мето-дом PASS.

2. Objects of investigation:. ?,?-unsaturated ketones, containing 5 (8 hydroxyquinoline) fragment, 2 pyrazolines and 2,3-dihydro-1H-1,5-benzodiazepines. The aim: the synthesis and investigation of structure, physical-chemical, spectral and che-lating properties of ?,?-unsaturated ketones, containing 5 (8 hydroxyquinoline) fragment and obtained on their base 2 pyrazolines and 2,3-dihydro-1H-1,5-benzodiazepines. The methods: organic synthesis, NMR1H, IR, UV-VIS spectroscopy of absorbance and emission, element analysis, PASS (Prediction of Activity Spectra for Substance). Scientific novelty: It is shown, that chalcones, based on 5 formyl and 5 acetylderivatives of 8 hydroxyquinoline, are obtained with good yields under alkali catalysis and have major s cis-trans-geometry of propenone fragment with its anti-orientation toward quinoline fragment. It is discovered, that the most basic center of these molecules is nitrogen atom of heterocycle, estimated constants its protona-tion and deprotonation of HO-group.It is shown, that the bro-mination of enone system may be done after the process of bro-mination of heterocycle is complete. It is estimated, that 5 (8 hydroxyquinoline) fragment causes considerable bato-chrome and batophlore effect, when it is introduced in position 3 of 2 pyrazoline. First the ability of 5 (8 hydroxyquinoline) derivatives of 2,3 dihydro-1H-1,5 benzodiazepine obtaining is shown. It is shown, that their synthesis is complicated by side process of contraction of seven-membered ring to five-membered. Application: it was optimized of synthesis conditions of 5 formyl-8 hydroxyquinoline by Reimer-Timan reaction. It was proposed of new group of ?,?-unsaturated ketones, containing 5 (8 hydroxyquinoline) fragment, with chelating properties and revealed opportunities of their application in 2 pyrazolines and 2,3-dihydro-1H-1,5-benzodiazepines synthesis, investigated their complexing and chromophoric properties. Computer esti-mation of biological activity of compounds obtained was done using PASS.

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. Орлов В.Д.

2. Orlov V.D.

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. Кутуля Л.А.
2. Кутуля Л.А.

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. Яременко Ф.Г.
2. Яременко Ф.Г.

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	Мчедлов-Петросян М.О.
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Мчедлов-Петросян М.О.
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.