Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0412U000814

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-04-2012

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Нікішин Олександр Олександрович

2. Nikishin Olexandr Olexandrovych

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: 15-03-2012

Спеціальність за освітою: 8.070303

Місце роботи здобувача: Державний заклад "Луганський національний університет імені Тараса Шевченка"

Код за ЄДРПОУ: 02125131

Місцезнаходження: 92703, Україна, м. Старобільськ, пл.Гоголя,1

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): 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: Державний заклад "Луганський національний університет імені Тараса Шевченка"

Код за ЄДРПОУ: 02125131

Місцезнаходження: 92703, Україна, м. Старобільськ, пл.Гоголя,1

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. 4,4-Дизаміщені функціоналізовані піридинхалькогенони: синтез, будова та властивості

2. 4,4-Disubstituted functionalized pyridinechalcogenones: synthesis, structure and properties

Реферат/анотація:

1. Об'єкти дослідження: 4,4-дизаміщені функціоналізовані піридинхалькогенони та їх похідні. Мета дослідження: синтез 4,4-дизаміщених функціоналізованих піридинхалькогенонів на основі активованих олефінів та СН-кислот за реакцією Міхаеля, встановлення будови отриманих сполук та вивчення їх властивостей. Методи дослідження та апаратура: синтез, фізико-хімічний аналіз із залученням ІЧ, ЯМР 1Н спектроскопії, ЯМР 13С спектроскопії, мас-спектрометрії, елементного та рентгеноструктурного аналізу, тонкошарової хроматографії, віртуального біологічного скринінгу з використанням комп'ютерної програми PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances) і біологічний скринінгу. Теоретичні і практичні результати: розроблені зручні препаративні методи синтезу раніше невідомих 4,4-дизаміщених частково гідрованих піридинхалькогенонів; на їх основі отримані похідні селеназоло[3,2-а]піридину, тіазоло[3,2-а]піридинів та піридо[3,2-е][1,3]тіазинів; підвищена синтетична доступність 4,4-дизаміщених піридинхалькогенонів - потенційно біоактивних речовин; за результатами біологічного скринінгу одержані сполуки проявили

антиоксидантні, антибактеріальні та фунгіцидні властивості. Новизна: вивчені методи синтезу 4,4-дизаміщених функціоналізованих піридинхалькогенонів за реакцією Міхаеля, а також можливі шляхи їх подальших хімічних трансформацій. Це дозволило розробити нові, регіоселективні, прості та зручні методи синтезу функціонально заміщених, потенційно біологічно активних частково гідрованих 4,4-дизаміщених піридинхалькогенонів та їх похідних, що містять в третьому положенні карбонітрильний, амідний, тіоамідний, етоксикарбонільний або тіазольний фрагменти. Доведено, що дитіоамід на відміну від монотіодіаміду малонової кислоти не може бути використаний як білдинг-блок для синтезу 4,4-дизаміщених піридинхалькогенонів з тіоамідним фрагментом у третьому положенні внаслідок елімінування сірководню. Запрограмовані ефективні методи синтезу раніше невідомих 4,4,6-триметил-2-оксо-1-феніл-1,2,3,4-тетрагідропіридин-3-карбонітрилу, отриманого за принципом "Доміно" та 1-етил-5,5-диметил-3,7-діоксо-1,2-діазепану на основі етилового естеру ізопропіліденціанооцтової кислоти та її гідразидів. Завдяки проведеним хімічним трансформаціям з отриманими сполуками виявлені їх основні нуклеофільні (атом сульфуру та амідний атом нітрогену) та електрофільні (ціаногруппи у положеннях 3,5 та С5-Н положення) реакційні центри. В умовах реакції Манніха вперше отримані 4-іміно-5,5-диметил-7-оксо-3-феніл(3-фур-2-іл)метилен-6-ціано-3,4,5,6,7,8-гексагідро-2Н-пірідо[3,2-е][1,3]тіазини. Проведені доклінічні випробування синтезованих сполук і встановлено, що деякі з них мають антибактеріальну, фунгіцидну та антиоксидантну активності. Ступінь упровадження: немає. Сфера (галузь) використання: Лабораторії та кафедри різних навчальних та наукових підрозділів де проводяться дослідження близьких за тематикою об'єктів та науково-дослідні центри для виявлення та вивчення біологічно-активних сполук.

2. Investigation objects: 4,4-disubstituted functionalized pirydynhalkohenony and their derivatives. Aim: Synthesis of 4,4-disubstituted functionalized pirydynhalkohenoniv based activated olefins and CH-acids by the reaction of Michael, establishing the structure of the obtained compounds and study their properties. Methods and apparatus: synthesis, physico-chemical analysis involving IR, 1H NMR spectroscopy, NMR 13 C spectroscopy, mass spectrometry, elemental and X-ray analysis, thin layer chromatography, virtual biological screening using a computer program PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances) and biological screening. Theoretical and practical results: developed convenient preparative methods of synthesis of previously unknown 4,4-disubstituted partially hydrogenated pirydynhalkohenoniv, based on these derivatives obtained selenazolo [3,2-a] pyridine, thiazolo [3,2-a] pyridines and pyrido [3,2-e] [1,3] thiazine; increased availability of synthetic 4,4-disubstituted pirydynhalkohenoniv - potentially bioactive compounds, the results of biological screening of the compounds obtained have shown antioxidant, antibacterial and fungicidal properties. Novelty: studied methods of synthesis of 4,4-disubstituted functionalized pirydynhalkohenoniv by Michael reaction and possible ways of further chemical transformations. It is possible to develop new, regioselectively, simple and convenient methods for synthesis of functionally substituted, potentially bioactive partially hydrogenated 4,4-disubstituted pirydynhalkohenoniv and their derivatives, containing the third position karbonitrylnyy, amide, thioamide, or etoksykarbonilnyy thiazole fragments. It is proved that dytioamid unlike monotiodiamidu malonic acid can be used as bildynh-block for the synthesis of 4,4-disubstituted pirydynhalkohenoniv with thioamide fragment in the third position due to elimination of hydrogen sulfide. Zaprovanovani efficient methods of synthesis of previously unknown obtained on a "Domino" and 1-ethyl-5 ,5-dimethyl-3 ,7-diokso-1 ,2-diazepanu based ethyl ester izopropilidentsianootstovoyi acid and its hydrazides. Thanks to its chemical transformations of the obtained compounds revealed their basic nucleophilic (sulfur atom and amide nitrogen atom) and electrophilic (tsianohruppy in regulations 3.5 and C5-H position) reaction centers. In a reaction Mannich 's first received Conducted pre-clinical testing of the synthesized compounds and found that some of them have antibacterial, fungicidal and antioxidant activity. Degree of implementation: None. Field (field) use: Laboratory and Department of various educational and research units which conducts research on topics close to facilities and research centers to identify and study of biologically active compounds.

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. Дяченко Володимир Данилович

2. Dyachenko Volodymyr Danylovych

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. Десенко Сергій Михайлович

2. Десенко Сергій Михайлович

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. Власов Сергій Віталійович
2. Власов Сергій Віталійович

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 — Орлов Валерій Дмитрович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні — Орлов Валерій Дмитрович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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

