Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U002348

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-05-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Водолаженко Марія Олександрівна
2. Vodolazhenko Mariia Oleksandrivna

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: 18-04-2019

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61001, 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 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: Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Однореакторна послідовна взаємодія 1,3-дикарбонільних СН-кислот з N,N-диметилформаміду диметилацеталем та метиленактивними нітрилами

2. One-pot sequential interaction of 1,3-dicarbonyl CH-acids with N,N-dimethylformamide dimethylacetal and active methylene nitriles

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці нових ефективних синтетичних методів для збільшення молекулярного різноманіття гетероциклів із використанням однореакторних послідовних взаємодій, поліфункціональних сполук та некласичних методів активації хімічних процесів з урахуванням принципів зеленої хімії на прик-ладі взаємодії 1,3-дикарбонільних СН-кислот з ДМФДМА та метиленактивними нітрилами. Знайдено, що гідроліз у кислотному середовищі проміжних 4-ціанобута-1,3-дієнолятів призводить до селективного утворення похідних 2-пірон-3-карбоксамідів, що дозволило розробити однореакторну тристадійну методику та синтезувати широ-ку бібліотеку таких сполук. Показано, що у водному середовищі відбувається активація амідної групи 4 ціанобута-1,3-дієнолятів, що призводить до селективного утворення похідних 2 піридон-3-карбонітрилів. Також проведено кінетичні дослідження та

запропоновано можливий механізм цього перетворення. При застосуванні 2-ціанометилбензімідазола як метиленактивного нітрила з циклічними СН-кислотами та ДМФДМА селективно утворюються 4-оксо-1,2,3,4-тетрагідробензо[4,5]імідазо[1,2-а]хінолін-6-іл ціаніди, з ациклічними □ кетоестерами – 4-ціанобензо[4,5]імідазо[1,2-а]піридин-2-карбоксилатів (каталіз пі-перидином в умовах мікрохвильового нагрівання) або 4 ціанобензо[4,5]імідазо[1,2-а]піридин-1-олатів (каталіз метилатом натрію при кімнатній температурі), які після обробки кислотою дають 1 гідроксибензо[4,5]імідазо[1,2-а]піридин-4-карбонітрили. Із використанням квантово-хімічних розрахунків було показано, що таутомерні рівноваги та стабільність 2-імінокумарин-3-карбоксамідів та 2-іміно-5-оксо-5,6,7,8-тетрагідро-2Н-хромен-3-карбоксамідів мають аналогічні тенденції, що свідчить про схожу поведінку цих сполук у хімічних перетвореннях. На основі експериментальних, літературних та розрахункових даних запропоновано механізми досліджуваних перетворень.

2. The thesis is dedicated to the development of new effective synthetic methods for increasing of molecular diversity of heterocycles based on one-pot sequential interactions, polyfunctional compounds, non-classical methods for activation of chemical processes and principles of green chemistry on example of an reaction between 1,3-dicarbonyl CH-acids, DMFDMA and methyleneactive nitriles. Hydrolysis of intermediate 4-cyanobuta-1,3-dienolates in an acidic medium results in the selective formation of 2-pyrone-3-carboxamide derivatives. This allowed us to develop a one-pot three step method and synthesize a wide library of such compounds. It was shown that activation of the amide group of 4-cyanobuta-1,3-dienolates takes place in the aqueous medium and leads to the selective formation of 2-pyridone-3-carbonitrile derivatives. Kinetic studies were also carried out, and a possible mechanism for this transformation has been proposed. When 2-cyanomethylbenzimidazole is used as the active methylene nitrile with cyclic CH-acids and DMFDMA, 4-oxo-1,2,3,4-tetrahydrobenzo[4,5]imidazo[1,2-a]quinolin-6-yl cyanides are selectively formed, and 4-cyanobenzo[4,5]imidazo[1,2-a]pyridine-2-carboxylates (piperidine in microwave heating) or 4-cyanobenzo[4,5]imidazo[1,2-a]-pyridin-1-olates (catalyzed by sodium methylate at room temperature) which gave 1 hydroxybenzo[4,5]imidazo[1,2-a]pyridine-4-carbonitriles after acid treatment, are formed in the reaction with acyclic □-ketoesters. Using quantum chemical calculations, it has been shown that tautomeric equilibrium and stability of 2-iminocoumarin-3-carboxamides and 2-imino-5-oxo-5,6,7,8-tetrahydro-2H-chromene-3-carboxamides have similar trends, which indicate a similar behavior of these compounds in chemical transformations. Based on experimental, literary and calculations data, the mechanisms of the studied transformations were 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. Горобець Микола Юрійович

2. Gorobets Mykola

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. Циганков Олександр Валерійович

2. Tsygankov Oleksandr

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 Федір Георгійович

2. Яременко Федір Георгійович

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 Дорошенко Андрій Олегович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Дорошенко Андрій Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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