Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U004395

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-10-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Морозова Аліса Дмитрівна

2. Morozova Alisa D.

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: 10-10-2019

Спеціальність за освітою: 8.04010101 – 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 26.217.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут органічної хімії НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул.Мурманська,5, м. Київ, Київська обл., 02660, 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: 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. 3(5)-Аміноізоксазоли у багатокомпонентних реакціях з карбонільними сполуками

2. 3(5)-Aminoisoxazoles in multicomponent reactions with carbonyl compounds

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню гетероциклізацій не заміщених за положенням С4 3- та 5-аміноізоксазолів з ароматичними альдегідами, СН-кислотами та їх похідними. Реакції за участю 5-аміноізоксазолів, альдегідів та кислоти Мельдрума або N,N`-диметилбарбітурової кислоти приводять до формування ізоксазоло[5,4-b]піридинових систем, тоді як 3-аміно-5-метилізоксазол у конденсації з даними карбонільними сполуками не вступає. Показано, що за умов взаємодії піровиноградних кислот з 5-аміно¬ізоксазолами остов останніх руйнується, адже є нестійким до дії кислот. Водночас, доміно-реакції за участю етил-4-арил-2-оксобут-3-еноатів у присутності скандій трифлату в ацетонітрилі приводять до ізоксазоло[5,4-b]дигідропіридинів та їх гетеро¬ароматичних аналогів (у випадку 3-метилпохідних). Варіювання умов проведення реакції дозволяє виділити два інтермедіати: 6-гідрокситетрагідропіридин та продукт □-приєднання аміну за С4 нуклеофільним центром до □,□-ненасиченого кетоестеру. Показана можливість нуклеофільного заміщення гідроксильної групи тетра¬гідропіридину молекулою розчинника (у

випадку проведення реакції в етанолі), або 5-аміно-3-метил- чи 3-фенілізоксазолу (у реакції бере участь С4 нуклеофільний центр аміну). Конденсації 3-аміно-5-метилізоксазолу з похідними піровиноградної кислоти проходять виключно за участю екзоциклічного атома Нітрогену та приводять до формування фуран-2(5Н)онів та 1,5-2Н-пірол-2-онів, не конденсованих з кільцем ізоксазолу. Проведено порівняльний аналіз електронної будови 5-аміно-3-метил- та 3-аміно-5-метілізоксазолу за даними РСА, 13С та 15N ЯМР спектроскопії.

2. The thesis is dedicated to the study of heterocyclization reactions of 3-amino and 5-aminoisoxazoles, unsubstituted in the position C4, aromatic aldehydes, and their derivatives. The reactions of 5-aminoisoxazoles, aldehydes, and Meldrum`s acid or N,N`-dimethylbarbituric acid without heating result in the formation of 4,6-diaryl-6,7-dihydroisoxazolo[5,4-b]pyridines. At the same time refluxing in n-butanol the starting mixture of 5-amino-3-methyl(tert-butyl)isoxazole, aromatic aldehydes, and Meldrum`s acid leads to the 4,7-dihydroisoxazolo[5,4-b]pyridine-6(5H)ones. 3-Amino-5-methyl¬isoxazole, in the reactions with the same reagents, does not lead to the formation of new heterocyclic compounds. It is shown that isoxazole moiety decomposes in condensations of pyruvic acids and 5-aminoisoxazoles due to its low stability in acidic media. On the other hand, domino-reactions with ethyl 4-aryl-2-oxobut-3-enoates in the presence of scandium triflate in acetonitrile open route to the isoxazolo[5,4-b]pyridines and their heteroaromatic analogs in case of 3-methyl derivatives. The unstable products of □-addition of the amine involving C4 nucleophilic center to □,□-unsaturated ketoester as well as 6-hydroxytetrahydropyridine have been isolated as intermediates when the condensation reactions have been carried out at lower temperatures. It is shown that the hydroxyl group in 6-hydroxypyridines undergoes nucleophilic substitution reactions: application of the ethanol as a solvent leads to the formation of the 6-ethoxy derivatives, while treating starting ethyl 4-aryl-2-oxobut-3-enoates or 6-hydroxytetrahydropyridines with an excess of 5-amino-3-methyl(phe¬nyl)isoxazole in acetonitrile/scandium triflate system results in the substitution involving C4 nucleophilic center of isoxazole moiety. In the reactions of 3-amino-5-methylisoxazole with pyruvic acid`s derivatives, the only exocyclic amino group is involved in condensations. Depending on the substituents in □,□-unsaturated pyruvic acid`s derivatives, different furan-2(5H)ones, and 1,5-2H-pyrrole-2-ones have been formed. A comparative analysis of the electronic structures of 5-amino-3-methyl and 3-amino-5-methylisoxazole, according to X-ray diffraction, 13C and 15N NMR spectroscopy data has been carried out.

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. Чебанов Валентин Анатолійович

2. Chebanov Valentyn A.

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. Комаров Ігор Володимирович
2. Komarov Igor V.

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. Фрасинюк Михайло Сергійович
2. Frasinyuk Mykhaylo S.

Кваліфікація: к. 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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Кальченко Віталій Іванович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Кальченко Віталій Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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