Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0319U002014

Державний реєстраційний номер: 0118U004009

Відкрита

Дата реєстрації: 07-02-2019

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка методик синтезу нових похідних сечовини.

Початок етапу: 01-2018

Закінчення етапу: 12-2018

Вид звітного документа: Без звіту

2. Виконавець

Назва організації: Донбаська державна машинобудівна академія

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070789

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: 84313, Краматорськ, вул. Академічна (Шкадінова), 72

Телефон: (0626) 41-69-42

Телефон: 41-63-15

E-mail: dgma@dgma.donetsk.ua

WWW: www.dgma.donetsk.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Донбаська державна машинобудівна академія

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070789

Адреса: вул. Академічна, буд. 72, м. Краматорськ, Донецька обл., 84313, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380626416809

E-mail: dgma@dgma.donetsk.ua

WWW: http://www.dgma.donetsk.ua/

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 52 - договір з вітчизняною організацією (органами місцевої ради, фондом, асоціацією, концерном тощо)

КПКВК: 2201040

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7706 - безплатно (договір про науково-технічне співробітництво, тощо)

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 0 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Синтез нових потенційно активних сполук на основі похідних сечовини та тіосечовини, прогнозування їх біологічної активності.

Назва роботи (англ)

Synthesis of new potentially active compounds based on urea and thiourea derivatives, prediction of their bioactivity.

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження: N-заміщені-N'-ацилтіосечовини та продукти їх взаємодії з дінуклеофілами. Мета дослідження: синтез похідних тіосечовини, вивчення їх реакцій з дінуклеофілами; отримання на основі похідних тіосечовини нових гетероциклічних сполук та пошук серед них за допомогою програми PASS можливої біологічної активності. Методи дослідження: фізико-хімічні методи дослідження речовин - спектроскопія протонного магнітного резонансу, спектроскопія ядерного магнітного резонансу ядер 13С, інфрачерво?на спектроскопія, мас-спектрометрія, елементний аналіз. Теоретичні і практичні результати: Засвоєна методика синтезу N арил-N'-ацилтіосечовин. Синтезовані N арил-N' ацилтіосечовини з різними замісниками у структурі - вихідні сполуки для вивчення взаємодії ацилтіосечовин з дінуклеофілами. Проведені реакції заміщених тіосечовин з дінуклеофілами: гідразином, фенілгідразином. Встановлено що N-заміщені-N'-ацилтіосечовини реагують з гідразином, утворюючи заміщені 3-аміно-1,2,4-триазоли і N заміщені тіосечовини. До цієї реакції вступають похідні карбонових кислот ароматичного, гетероциклічного і аліфатичного ряду; похідні арил-, аралкіл-, гетероариламінів. Реакція N заміщених-N'-ацилтіосечовин з фенілгідразином протікає тільки з найбільш активними ацилтіосечовинами і приводить до селективного утворення заміщених 1-феніл-3-аміно-1,2,4-триазолів. Структурний мотив "шестичленний цикл - один атом - п'ятичленний цикл" характерний для багатьох біологічно активних речовин. Тому, згідно концепції молекулярної подібності ("близькі структури мають близькі властивості") можна припускати що отримані заміщені 3-аміно-1,2,4-триазоли та 1 феніл 3 аміно-1,2,4-триазоли - потенційно біологічно активні сполуки. Ефективність впровадження: 3-аміно-1,2,4-триазоли, 1-феніл-3-аміно-1,2,4-триазоли та N заміщені тіосечовини є потенційними біологічно активними сполуками і можуть використовуватися в якості лікарських препаратів, пестицидів. Сфера (галузь) застосування: в загальних та спеціальних курсах органічної хімії у університетах. Серед отриманих продуктів можна вести пошук нових лікарських препаратів.

Реферат (англ)

Object of research: N-substituted-N'-acylthioureas and products of their interaction with dinucleophiles. Objective of research: synthesis of derivatives of thiourea, study of their reactions with dinucleophiles; obtaining of new heterocyclic compounds based on the thiourea derivatives and determine of their possible biological activity using the PASS program. Research methods: physical and chemical methods for the investigation of compounds: IR, NMR 1H, NMR 13C spectroscopy, elemental analysis. Theoretical and practical results: The technique of synthesis of N aryl-N'-acyltiourea has been mastered. N-Aryl-N'-acyltioureas with different substituents in the structure have been synthesized. These compounds are the starting compounds in reactions of acylthioureas with dinucleophiles. Reactions of substituted thiourea with dinucleophiles: hydrazine, phenylhydrazine have been studied. It has been found that N-substituted-N'-acylthioureas are reacted with hydrazine to form substituted 3-amino-1,2,4-triazoles and N-substituted thioureas. The derivatives of carboxylic acids of the aromatic, heterocyclic and aliphatic series (derivatives of aryl, aralkyl, heteroaryl amines) can react under this scheme. The reaction of N-substituted-N'-acyltiourea with phenylhydrazine proceeds only with the most active acyloxyureas and leads to the selective formation of substituted 1-phenyl 3-amino-1,2,4-triazoles. The structural fragment "six-member cycle - one atom - five-member cycle" is characteristic of many biologically active substances. Therefore, according to the concept of molecular similarity ("similar structures have similar properties") it can be assumed that the resulting substituted 3-amino-1,2,4-triazoles and 1-phenyl 3-amino-1,2,4-triazoles are potentially biologically active compounds.

Індекс УДК: 547.2/.4, 31.21.21

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.21

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Зразки заміщених 3-аміно-1,2,4-триазолів, 1-феніл 3-аміно-1,2,4-триазолів і N заміщені тіосечовин.

Назва продукції (англ): Samples of 3-amino-1,2,4-triazoles, 1-phenyl 3-amino-1,2,4-triazoles, and N-substituted thioureas.

Очікувані результати:

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції. Виробництво основних фармацевтичних продуктів і фармацевтичних препаратів.

Опис продукції (укр): Засвоєна методика синтезу N арил-N'-ацилтіосечовин. Синтезовані N арил-N' ацилтіосечовини з різними замісниками у структурі - вихідні сполуки для вивчення взаємодії ацилтіосечовин з дінуклеофілами. Проведені реакції заміщених тіосечовин з дінуклеофілами: гідразином, фенілгідразином. Встановлено що N-заміщені-N'-ацилтіосечовини реагують з гідразином, утворюючи заміщені 3-аміно-1,2,4-триазоли і N заміщені тіосечовини. До цієї реакції вступають похідні карбонових кислот ароматичного, гетероциклічного і аліфатичного ряду; похідні арил-, аралкіл-, гетероариламінів. Реакція N заміщених-N'-ацилтіосечовин з фенілгідразином протікає тільки з найбільш активними ацилтіосечовинами і приводить до селективного утворення заміщених 1-феніл-3-аміно-1,2,4-триазолів. Структурний мотив "шестичленний цикл - один атом - п'ятичленний цикл" характерний для багатьох біологічно активних речовин. Тому, згідно концепції молекулярної подібності ("близькі структури мають близькі властивості") можна припускати що отримані заміщені 3-

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 2021

Виробник продукції: Донбаська державна машинобудівна академія

Споживачі продукції: Класичні університети, кафедри органічної хімії.

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1.Лахтаренко Н.В., Коновалова С.А. Окисление метилфенилсульфида пероксисольватом карбоната натрия // Вопросы химии и химтехнологии. - 2018. - № 1. - С. 37-45.

8. Звітна документація

Робота виконується без звіту

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Авдєєнко Анатолій Петрович

Коновалова Світлана Олексіївна

Керівник організації:

Турчанін Михайло Анатолійович

Керівники роботи:

Авдєєнко Анатолій Петрович (к. х. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.