Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0219U101853

Державний реєстраційний номер: 0115U004731

Відкрита

Дата реєстрації: 15-11-2019

1. Етапи виконання

Номер етапу: 4

Назва етапу: Синтез гетероциклічних сполук на основі N-ацетил-1,4-хінонімінів.

Початок етапу: 09-2018

Закінчення етапу: 06-2019

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Донбаська державна машинобудівна академія

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070789

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

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

Телефон: 380626416809

E-mail: dgma@dgma.donetsk.ua

WWW: http://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: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 2201160

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 23.5 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Синтез гетероциклічних сполук на основі N-заміщених 1,4-хінонімінів.

Назва роботи (англ)

Synthesis of heterocyclic compounds on the basis of N-substituted 1,4-quinoneimines.

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження: незаміщені та галогензаміщені у хіноїдному ядрі N-ацил(ацетил)-1,4-бензохінон-моноіміни. Мета дослідження: синтез нових гетероциклічних потенційно біологічно активних сполук на основі N-ацил(ацетил)-1,4-бензохінонмоноімінів, встановлення закономірностей роданування, бромування N- ацил(ацетил)-1,4-бензохінонмоноімінів, реакції N-ацил-1,4-бензохінонмоноімінів з єнамінами. Методи дослідження: органічний синтез, фізико-хімічні методи дослідження органічних сполук: ІЧ-, ЯМР 1Н, ЯМР 13С спектроскопія, елементний аналіз, рентгеноструктурний аналіз, тонкошарова та колонкова хроматографія. Теоретичні і практичні результати: синтезовано нові гетероциклічні сполуки на основі N- N-ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів. Доведено їх будову за результатами спектральних (ІЧ, ПМР, ЯМР 13С) даних і даних елементного аналізу. В результаті роданування N-ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів встановлено, що напрямок реакції залежить від величини енергії НСМО вихідного хінонмоноіміна - для хінонмоноімінов з низькою енергією НСМО 1,4-приєднання йде атомом сульфуру роданід-іона з орбітальним контролем, для хінонмоноімінов з високою енергією НСМО - атомом нітрогену з зарядовим контролем. В результаті дії брому на галогенвмісні N-ацетил-1,4-бензохінонмоноіміни, що мають одне вільне положення 3 або 5 хіноїдного ядра, отримані 6-гідрокси-2-метил(арил)-1,3-бензоксазоли, що є досить простим методом синтезу останніх. Ефективність впровадження: гетероциклічні сполуки на основі N-ацил(ацетил)-1,4-бензохінонмоноімінів є потенційними біологічно активними сполуками і можуть використовуваться в якості лікарських препаратів, пестицидів. Сфера (галузь) застосування: в загальних та спеціальних курсах органічної хімії у класичних університетах. Серед отриманих продуктів можна вести пошук нових лікарських препаратів.

Реферат (англ)

Object of research: unsubstituted and halogensubstituted in the quinoid ring N- acyl(acety)l -1,4-benzoquinoneimines. Objective of research: to find the rules of the influence of the steric and donor-acceptor properties of the substituents near the nitrogen atom in N acyl(acetyl) 1,4-benzoquinonemjnoimines on their reactivity to nucleophiles, and also the synthesis of new heterocyclic potentially bioactive compounds on their basis. Research methods: organic synthesis, physical and chemical methods for the investigation of organic compounds: IR, NMR 1H, NMR 13C spectroscopy, elemental analysis, X-ray diffraction analysis, thin layer and column chromatography. Theoretical and practical results: new heterocyclic compounds on the basis of N-acyl((acetyl) -1,4-benzoquinoniminoimines were synthesized. Their structures were proved by the spectral (IR, PMR, NMR 13C) data and elemental analysis. In the interaction of N -acetyl-1,4-benzoquinone monoimin with potassium rhodanite, depending on the energy of the LUMO of the original quinone monoimin, benzo [d] [1,3] oxathiol-2-ones and benzo [d] oxazol-2 (3H) - derivatives were obtained thiones. At the first stage of the reaction, the high value of the energy of the LUMO promotes the addition of rodanide ion to the nitrogen atom, the low value to the addition by the sulfur atom.. As a result of the action of bromine on the halogen-containing N-acetyl -1,4-benzoquinoniminoimines having one free position of 3 or 5 of the quinidic nucleus, 6-hydroxy-2-methyl(aryl)-1,3-benzoxazoles are obtained, which is quite a simple method of synthesis of the latter. Efficiency of introduction: heterocyclic compounds based on N-acyl-1,4-benzoquinonmonoimines are potential biologically active compounds and can be used as drugs, pesticides. Application area: in the general and special courses of organic chemistry in classical universities. The products obtained in this work can be tested as new drugs.

Індекс УДК: 547, 547.567.5; 547.411

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Нові гетероциклічні сполуки на основі N-ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів.

Назва продукції (англ): New of heterocyclic compounds on basis of N-acetyl-1,4-benzoquinoneimines.

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Дослідження і розробки в галузі природничих та технічних наук.

Опис продукції (укр): Синтезовано нові гетероциклічні сполуки на основі N-ацетил-1,4-бензохінонмоноімінів. В результаті роданування встановлено, що напрямок реакції залежить від величини енергії НСМО вихідного хінонмоноіміна - для хінонмоноімінов з низькою енергією НСМО 1,4-приєднання йде атомом сульфуру роданід-іона з орбітальним контролем, для хінонмоноімінов з високою енергією НСМО - атомом нітрогену з зарядовим контролем. Їх будову доведено за результатами спектральних (ІЧ, ПМР, ЯМР 13С) даних і даних елементного аналізу. В результаті дії брому на галогенвмісні N-ацетил-1,4-бензохінонмоноіміни, що мають одне вільне положення 3 або 5 хіноїдного ядра, отримані 6-гідрокси-2-метил(арил)-1,3-бензоксазоли, що є досить простим методом синтезу останніх. В результаті реакції з єнамінами отримано похідні бензофурану. Вивчено ймовірні механізми даної реакції. Також досліджено вплив розчинників різної природи на перебіг реакції циклізації та з'ясовано, що єдиними гетероциклічними продуктами є похідні бензофурану. Отримано гетероциклічні продукти, які є потенційними біологічно активними сполуками.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 01.202012.2020

Виробник продукції: ДДМА

Споживачі продукції: Класичні університети, кафедри органічної хімії.

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: Наукові публікації.

Форми та умови передачі продукції: Наукові публікації.

7. Бібліографічний опис

Активированная стерически напряженная связь C = N в замещенных п-хинононо- и дииминах. XVI. Закономерности в ее проявлении / А. П. Авдеенко, С. А. Коновалова, С. В. Шишкина [и др.] // Журнал органической химии. – 2018. – Т. 54, Вып. 1. – С. 62–77.

Активированная стерически напряженная связь C = N в замещенных п-хинононо- и дииминах. XVII. Циклогексеновые полигалогеновые структуры на основе N-арилсульфонил-п-хинониминов / А. П. Авдеенко, С. А. Коновалова, С. В. Шишкина [и др.] // Журнал органической химии. – 2018. – Т. 54, Вып. 5. – С. 671–686.

Лисенко О.М. Синтез і біологічна активність 1,3-бензоксатіол-2-ону / Лисенко О.М., Коновалова С.О., Авдєєнко А.П. // X Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські питання-2018». - Харьків-2018. - С.112-113.

Лисенко О.М. Синтез N-ариламінокарбоніл-1,4-бензохінонмоноімінів / Лисенко О.М., Коновалова С.О., Авдєєнко А.П. // Тези доповідей II Всеукраїнської наукової конференції. Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи. Збірник матеріалів конференції - Житомир-2018. - С.284-285.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 31

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Керівник організації:

Турчанін Михайло Анатолійович (д. х. н., професор)

Керівники роботи:

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

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.