



ІТК «Інститут монокристалів» НАНУ
Інститут хімії функціональних матеріалів
Відділ органічної та біоорганічної хімії

ЗВІТ ЗА ДРУГИЙ РІК АСПІРАНТУРИ ЗА ТЕМОЮ
СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ НЕПРИРОДНИХ АЛЬФА-АМІНОКИСЛОТ ТА
ЇХ ПОХІДНИХ

Доповідач:

О.В. Бурахов

Керівник:

д.х.н. проф., чл.- кор. НАН України

В.А. Чебанов

Онлайн-засідання Вченої ради ІХФМ

2024

Освітня складова другого року аспірантури

Виповнена в повному обсязі:

1. Сучасні методи синтезу та аналізу.

Складено іспит на відмінно.

2. Підготовка наукових публікацій і проектів.

Складено іспит на відмінно.

3. Сучасні методи дослідження органічних речовин.

Складено іспит на відмінно.

4. Будова органічних речовин.

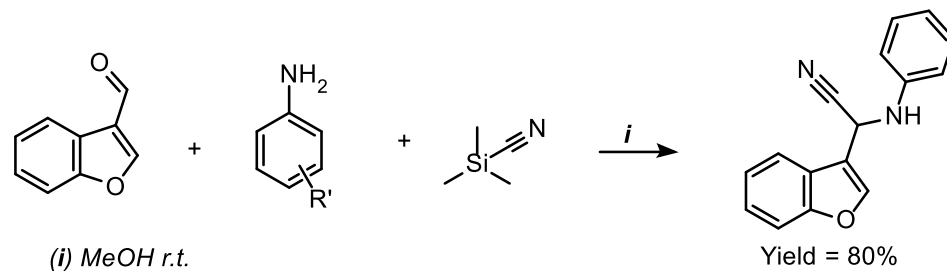
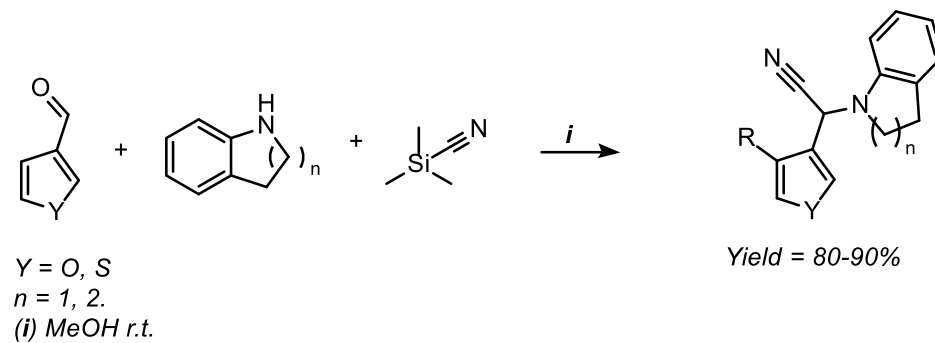
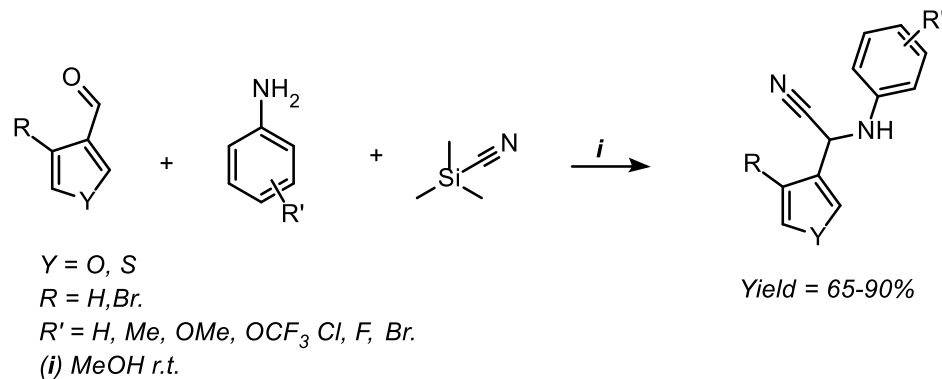
Складено іспит на відмінно.

Наукова складова другого року аспірантури

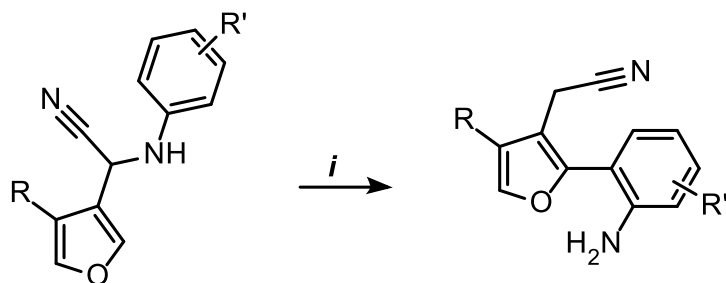
Мета

Вивчення нового [3.3] сігматропного перегрупування гетероциклічних N-ариламініонітрилів: розробка методології, визначення об'єктів які вступають у відповідне перегрупування, механізм перегрупування.

Наукова складова другого року аспірантури



Перегрупування гетероциклічних N-арил амінонітрилів



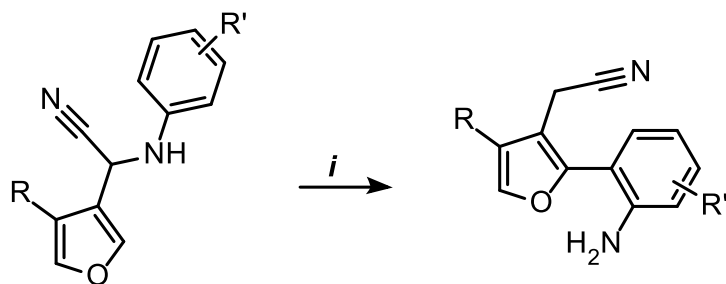
$R = H, Br.$

$R' = H, Me, OMe, OCF_3, Cl, F, Br.$

(i) H_3PO_4 , r.t.

R	R'	Time	Y%	comment
H	H	6 hours	60	
Br	H	6 hours	50	
Br	4-Me	6 hours	55	
H	2-Me	6 hours	55	
H	3-Me	6 hours	55	15% of another regioisomer
H	4-Me	6 hours	60	
H	2-OMe	6 hours	55	
H	3-OMe	6 hours	50	15% of another regioisomer
H	4-OMe	6 hours	55	
H	2-F	6 hours	55	
H	3-F	6 hours	50	15% of another regioisomer
H	4-F	6 hours	55	
H	2-Cl	6 hours	50	
H	3-Cl	6 hours	50	15% of another regioisomer
H	4-Cl	6 hours	45	
H	2-Br	6 hours	35	
H	4-Br	6 hours	35	
H	4-CF ₃	6 hours	0	Complex mixture

Перегрупування гетероциклічних N-арил амінонітрилів



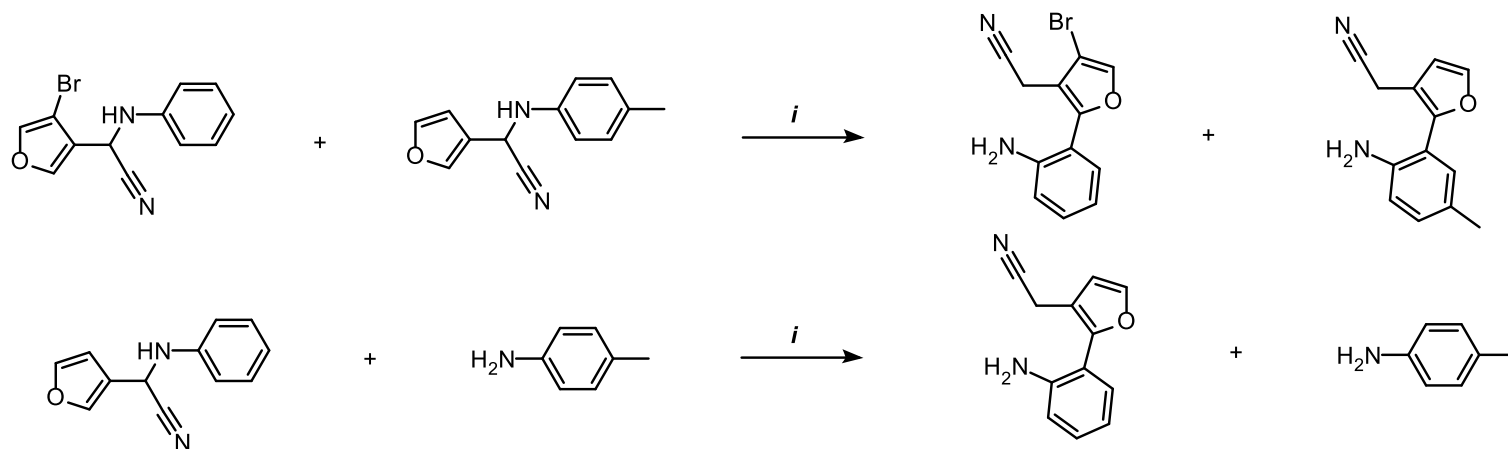
$R = H, Br.$

$R' = H, Me, OMe, OCF_3, Cl, F, Br.$

(i) H_3PO_4 , r.t.

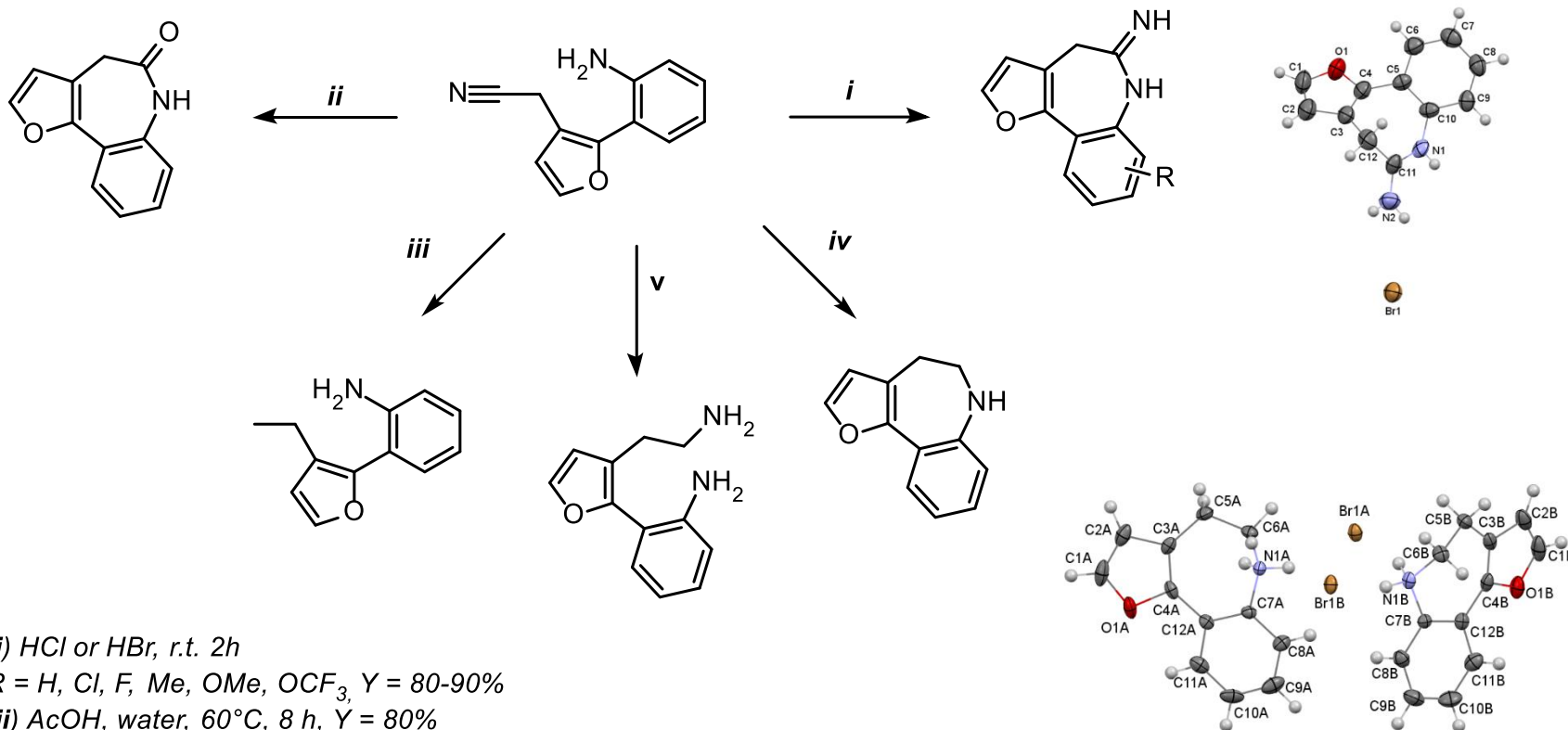
R	R'	Time	Y%	comment
H	2-OCF ₃	6 hours	45	
H	4-OCF ₃	6 hours	50	Only starting material
H	4-OCF ₂ Cl	6 hours	50	
H	4-OCHF ₂	6 hours	50	
H	2-SCF ₃	6 hours	45	
H	4-	6 hours	30	
H	4-	6 hours	50	
H	4-	6 hours	55	
H	4-	6 hours	55	
H	4-	6 hours	55	

Перегрупування гетероциклічних N-арил амінонітрилів

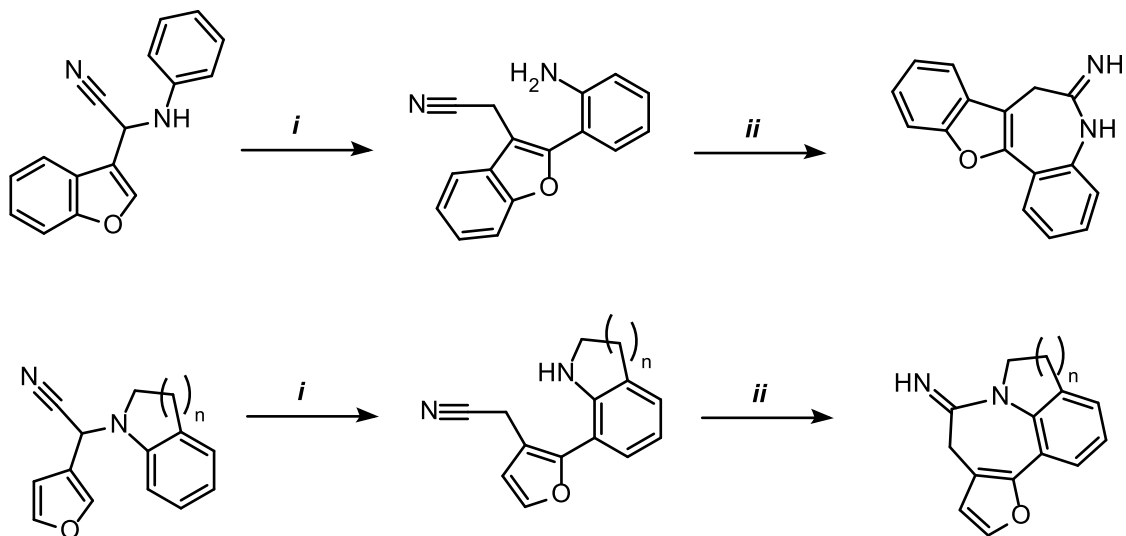


(i) H_3PO_4 , r.t.

Перегрупування гетероциклічних N-арил амініонітрилів

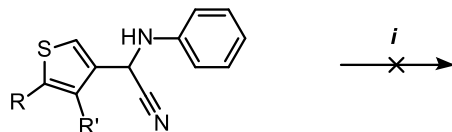


Перегрупування гетероциклічних N-арил амінонітрилів



(i) H_3PO_4 , r.t. $Y = 70\%$
(ii) HCl , $60^\circ C$, 6 h, $Y = 80\%$
 $n = 1; 2.$

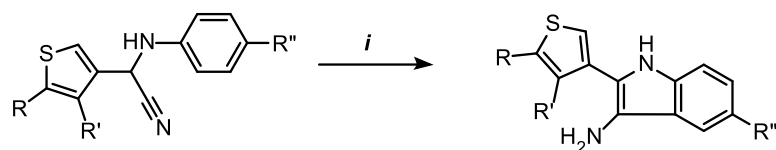
Перегрупування гетероциклічних N-арил амінонітрилів



$R = H, Br.$

$R' = H, Br.$

(i) H_3PO_4 , r.t.

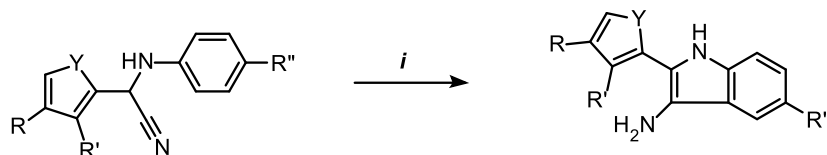


$R = H, Br.$

$R' = H, Br.$

$R'' = OMe.$

(i) H_3PO_4 , r.t.



$Y = O, S$

$R = H, Br.$

$R' = H, CO_2Me$

$R'' = OMe.$

(i) H_3PO_4 , r.t.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Оптимізована методика синтезу вихідних амініонітрилів.

Розроблена методика проведення нового [3.3] сігматропного перегрупування.

Розроблені нові методики синтезу заміщених дегідро бензо[b]фуоро[2,3-d] азепінів.

Синтезовані раніше не описані гетероціклічні сполуки з ортогональними функціональними групами.

Публікації за звітний період

Buravov O., Tomak V., Shishkina S., Chebanov V. First example of Aryl-Hetaryl Cross-Coupling via [5.5]-Sigmatropic Rearrangement // Synthesis, 2024.

<https://doi.org/10.1055/s-0043-1775403>.

ТЕЗИ:

Oleksandr Buravov, Svitlana Shishkina, Valentyn Chebanov. "SIGMATROPIC HETEROAROMATIC REARRANGEMENTS OF HETEROCYCLIC N-ARYLAMINONITRILES". "XXVI УКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ З ОРГАНІЧНОЇ ТА БІООРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ" 16-20 вересня 2024 року, Ужгород, Україна, Р-94.

ДЯКУЮ ЗА УВАГУ!