

Аңдатпа

8D07105 «Органикалық заттардың химиялық технологиясы» мамандығы бойынша PhD философия докторы ғылыми дәрежесін алу үшін Аманкулова Динара Еркиновнаның «1,3-Циклогенсандионнан *мета*-арилоксифенолдарды каталитикалық емес синтездеу әдісін жасау» тақырыбындағы диссертациясына

Жалпы жұмыс сипаттамасы. Бұл жобаның мақсаты 1,3-циклогександионнан *мета*-(арилокси)фенолдарды каталитикалық емес синтездеу әдісін жасау болып табылады. Мақсаты оңай қол жетімді бастапқы материалдарды пайдалана отырып, *мета* алмастырылған фенолдарды алудың қарапайым және тиімді әдісін қамтамасыз ету.

Зерттеу тақырыбының өзектілігі. *Мета*-(арилокси)фенолдар олардың тиімді және жан-жақты химиялық қасиеттері үшін кеңінен зерттелген. Олар фармацевтикалық препараттар, агрохимиялық заттар және бояғыштар сияқты табиғи және биологиялық белсенді қосылыстарды синтездеу үшін пайдалы синтетикалық аралық өнімдер ретінде қызмет етеді. Сонымен қатар, *мета*-(арилокси)фенолдар ерекше антиоксиданттық, микробқа қарсы және қабынуға қарсы әрекеттерді көрсетеді, бұл оларды өнеркәсіптік және медициналық қолданулардың кең ауқымы үшін әлеуетті үміткерлер етеді.

Сонымен қатар, бұл фенолдардың *мета* алмастырылған табиғаты нақты қолданбалар үшін оңтайландырылатын бірегей стерикалық және электрондық қасиеттерді беру арқылы олардың өнімділігін одан әрі арттырады. Бұл қасиет көптеген химиялық процестерде, соның ішінде асимметриялық синтезде, айқаспалы байланыс реакцияларында және полимерленуде қолданылатын жоғары селективті және тиімді катализаторларды, лигандтарды және хиральды көмекші заттарды жасауға мүмкіндік береді.

Мета-(арилокси)фенолдардың синтезі реакцияның күрделі сипатына және жоғары өнімділік пен селективтілікке қол жеткізудің қиындығына байланысты органикалық химияда ұзақ уақыт проблема болып келді. Кәдімгі синтез әдістері өтпелі металл катализаторларын қолдануды қамтиды, олар қымбат болуы мүмкін және жиі реакцияның қатал шарттарын талап етеді, бұл қажетсіз жанама өнімдерге және төмен өнімділікке әкелуі мүмкін. Сонымен қатар, өтпелі металдарды пайдалану экологиялық проблемаларды тудыруы мүмкін, ал соңғы өнімде металл қалдықтарының болуы олардың әртүрлі салаларда, соның ішінде фармацевтика мен материалтануда қолданылуын шектеуі мүмкін.

Сонымен қатар, *мета* алмастырылған фенолдардың стерикалық және электрондық қасиеттері осы қосылыстардың синтезін одан әрі қиындата алатын ерекше орынбасарларға өте тәуелді. Орынбасарлардың орналасуы мен табиғатын нақты бақылауға қол жеткізу қиын болуы мүмкін, ал реакция

жағдайларындағы аздаған өзгерістер өнімнің таралуы мен қасиеттерінің айтарлықтай өзгеруіне әкелуі мүмкін.

Осы проблемаларға қарамастан, *мета*-(арилокси)фенолдарды синтездеудің тиімді және практикалық әдістерін әзірлеу олардың кең ауқымды қолдануына байланысты, олардың синтетикалық аралық өнімдер ретінде, сондай-ақ медициналық және өнеркәсіптік қолдануда қолданылуына байланысты үлкен маңызға ие. Осыған байланысты химияның әртүрлі салаларында кеңінен қолдануға мүмкіндік беретін оларды синтездеу үшін тиімдірек және экологиялық таза әдістерді әзірлеу бойынша жұмыс жалғасуда.

Мәселенің даму дәрежесі. *Мета*-(арилокси)фенолдардың синтезі бойынша зерттеулердің қазіргі жағдайы айтарлықтай прогресті көрсетті. Бұл қосылыстарды синтездеу үшін әртүрлі әдістер әзірленгенімен, каталикалық емес әдіс өнеркәсіптік ауқымда өндіру және шығындарды азайту мүмкіндігіне байланысты ерекше қызығушылық тудырады. Соңғы зерттеулер реакция жағдайларын оңтайландыруға және өнімділікті арттыруға, сондай-ақ әртүрлі қолданбаларда алынған қосылыстардың әмбебаптығын зерттеуге бағытталған.

Осы саладағы жетістіктерге қарамастан, *мета*-(арилокси)фенолдардың каталикалық емес синтезінің тиімді және практикалық әдістерін одан әрі дамыту үшін әлі де мүмкіндіктер бар. Болашақ зерттеулер шығымдылық пен селективтілікті арттыру үшін балама реакция жағдайлары мен реагенттерді пайдалануға, сондай-ақ күрделі және әртүрлі құрылымдарға қол жеткізудің жаңа синтетикалық жолдарын әзірлеуге бағытталуы мүмкін.

Диссертациялық зерттеудің мақсаты. Бұл диссертациялық зерттеудің мақсаты 1,3-циклогександионнан *мета*-(арилокси)фенолдарды синтездеудің тиімді және жаңа әдісін жасау болып табылады.

Осы мақсатқа жету үшін келесі міндеттер қойылды:

- Вильсмайер реагентінің көмегімен циклогексан-1,3-дионнан 3-хлороциклогекс-2-ен-1-бір түзілуі;
- нуклеофильді орын басу реакциясы арқылы 3-(арилокси)циклогекс-2-ен-1-он алу шарттарына зерттеу жүргізу;
- 3-(арилокси)циклогекс-2-ен-1-онды C(2) бромдау арқылы бағыттаушы топты енгізу;
- тотықтырғыш ароматизация әдісімен *мета*-(арилокси)фенолдарды синтездеу шарттарын зерттеу;
- ИК-спектроскопия, масс-спектрометрия және ЯМР спектроскопиясы сияқты әртүрлі әдістермен синтезделген қосылыстардың құрылымдық талдауы;
- аралық және соңғы қосылыстарды синтездеу және өндірістің материалдық балансын есептеу үшін әзірленген әдістердің технологиялық схемаларын ұсыну.

Қорғауға ұсынылған диссертацияның негізгі қағидалары:

1. *Мета*-(арилокси)фенолдарды циклогексан-1,3-дион арқылы синтездеудің жаңа тәсілі, оның ішінде төрт сатылы синтез хаттамасы әзірленді. Бұл әдіс барлық сегіз қосылыстар үшін орташа шығымдылығы 66% болатын үлкен мөлшерде сегіз *мета*-(арилокси)фенол берді.

2. Әдіс синтез процесін оңайлатуға және оңтайландыруға әкелетін оттегінің орто-, пара-бағытты әсерін айналып өту операцияларын болдырмауға мүмкіндік береді. 1,3-функционалды топтардың қажетті арақатынасы қажетті *мета*-(арилокси)фенолдарға оңай қол жеткізуге мүмкіндік беретін оңай қол жетімді циклогексан-1,3-дион бастапқы материалына тән.

3. Синтездеу әдісі ауыр металдарды немесе лигандтарды қолдануды қажет етпейді, бұл оны дәстүрлі әдістерге неғұрлым экологиялық және қауіпсіз алмастыруға мүмкіндік береді.

Диссертациялық жұмыстың зерттеу объектілері циклогексан-1,3-дион және оның туындылары, сонымен қатар *мета*-(арилокси)фенолдарды синтездеу үшін әртүрлі реагенттер мен жағдайлар болып табылады.

Зерттеу пәні циклогексан-1,3-дионнан *мета*-(арилокси)фенолдарды синтездеудің жаңа тиімді әдісін жасау болып табылады.

Диссертация Қазақстан Республикасы Үкіметінің жанындағы Жоғары ғылыми-техникалық комиссия бекіткен ғылымды дамытудың басым бағыттарына сәйкес орындалды. Атап айтқанда, бұл жаратылыстану ғылымдары саласындағы ғылыми зерттеулерге қатысты.

Зерттеу әдістері – масс-спектрометрия, ИҚ-спектроскопия, ^1H , ^{13}C ЯМР спектроскопиясы.

Жұмыстың ғылыми жаңалығы.

- Төрт сатыдағы 1,3-циклогександионнан *мета*-арилоксифенолдарды каталитикалық емес синтездеудің жаңа және тиімді әдісі. Барлық қадамдар жоғары температураны қажет етпейді және ауыр металдар мен лигандтарды қамтымайды.

- Әдіс сегіз түрлі *мета*-арилоксифенолды синтездеу үшін сәтті қолданылды, оның төртеуі бұрын әдебиетте сипатталмаған. Сонымен қатар, әдістеме 16 аралық өнімді берді, оның 14-і бұрын әдебиетте айтылмаған.

- Жаңа синтезделген қосылыстардың химиялық құрылымы алғаш рет аналитикалық әдістердің комбинациясы арқылы сипатталады.

Теориялық және практикалық маңызы. Жасалған әдістің теориялық маңыздылығы 1,3-циклогександионнан *мета*-(арилокси)фенолдарды синтездеудің жаңа тиімді тәсілін ашуда. Бұл тәсіл ауыр металдарды немесе лигандтарды қолдануды көздейтін және оттегінің орто-, пара-бағытты әсерін айналып өту үшін қосымша қадамдарды қажет ететін дәстүрлі әдістерге бірегей балама ұсынады.

Бұл әдістің практикалық маңыздылығы оның өнеркәсіптік қолдану перспективасында жатыр, өйткені ол *мета*-(арилокси)фенолдарды

синтездеуге үнемді және экологиялық таза тәсілді ұсынады. Бұл қосылыстардың әртүрлі салаларда, соның ішінде фармацевтикада, агрохимияда және бояғыштарда, сондай-ақ әртүрлі химиялық процестерде қолданылатын жоғары селективті және тиімді катализаторларды, лигандтарды және хиральды көмекші заттарды жасауда қолданудың кең ауқымы бар. Әзірленген әдісті нақты өнеркәсіптік және медициналық қолдану үшін оңтайландыруға болатын қажетті стерикалық және электронды қасиеттері бар жаңа метаалмастырылған фенолды қосылыстарды синтездеу платформасы ретінде де пайдалануға болады.

Ғылымды дамытудың басым бағыттарына немесе мемлекеттік бағдарламаларға сәйкестігі. Диссертация Қазақстан Республикасы Үкіметінің жанындағы Жоғары ғылыми-техникалық комиссия бекіткен ғылымды дамытудың басым бағыттарына сәйкес орындалды. Атап айтқанда, бұл жаратылыстану ғылымдары саласындағы ғылыми зерттеулерге қатысты.

Автордың жеке үлесі. Автор эксперименттерді әзірлеуге және жүргізуге, теориялық және практикалық мәселелерді шешуге және нәтижелерді түсіндіруге үлкен үлес қосты. Ол Альберта университетіндегі доктор Клайв тобының зертханасында зерттеушілермен жұмыс істеді.

Ол сондай-ақ *Molecules* журналында жарияланған шолу мақаласын дайындауда және жазуда маңызды рөл атқарды. Сонымен қатар, автор *Tetrahedron* журналында жарияланған мақалада қарастырылған 51 қосылыстардың 24-ін синтездеді.

Жұмысты апробациялау. Диссертацияның негізгі ережелері мен нәтижелері халықаралық конференцияда: «Фараби әлемі – 2023» студенттер мен жас ғалымдардың 2023 жылғы конференциясында ұсынылып, талқыланды.

Жарияланымдар. Осы диссертация бойынша жүргізілген зерттеу барысында үш ғылыми мақала жарияланды. Тетраэдрдегі Q2 (60% процентиль) бағаланған мақала және Q2 бағаланған *Molecules* (83% процентиль) мақаласын қамтиды. Сонымен қатар, бұл зерттеудің нәтижелері 2023 жылы «Фараби әлемі – 2023» студенттер мен жас ғалымдардың конференциясы сияқты халықаралық конференцияларда ұсынылып, талқыланды.

Диссертацияның құрылымы мен көлемі. Диссертация машинада басылған 115 бет түрінде ұсынылған және аббревиатурадан, кіріспеден, әдебиеттерге шолудан, нәтижелерді талқылаудан, тәжірибелік бөлімнен, қорытындыдан және 128 тақырыптан тұратын әдебиеттер тізімінен, сонымен қатар 50 беттік қосымшадан тұрады. Диссертациялық жұмыста 75 диаграмма, 5 сурет және 25 кесте бар.