

TỔNG HỢP VÀ TÍNH CHẤT CỦA MỘT SỐ AXETAMIDOARYL-1,3,4-OXADIAZOL-2-THIOL

1. Họ và tên nghiên cứu sinh: NGUYỄN THỊ SƠN

2. Giới tính: Nữ

3. Ngày sinh: 24/4/1979

4. Nơi sinh: Hà Nội

5. Quyết định công nhận nghiên cứu sinh: 2259/SĐH ngày 7/12/2006 của Giám đốc Đại học Quốc gia Hà Nội

6. Các thay đổi trong quá trình đào tạo: Không

7. Tên đề tài luận án: Tổng hợp và tính chất của một số axetamidoaryl-1,3,4-oxadiazol-2-thiol

8. Chuyên ngành: Hóa Hữu cơ

9. Mã số: 62 44 27 01

10. Cán bộ hướng dẫn khoa học: PGS.TSKH. Lưu Văn Bôi

11. Tóm tắt các kết quả mới của luận án:

Trong thời gian nghiên cứu, các nội dung của luận án đã được hoàn thành với những kết quả chính như sau:

- Đã hoàn thiện và ứng dụng phương pháp mới thân thiện hơn với môi trường là thiocacbamoyl hóa các dẫn xuất axetamidobenzoyl hidrazit bằng TMTD và đã điều chế được 7 dẫn xuất 5-(axetamidoaryl)-1,3,4-oxadiazol-2-thiol với hiệu suất cao, trong đó có 6 hợp chất mới.

- Đã nghiên cứu phản ứng giữa 5-(axetamidoaryl)-1,3,4-oxadiazol-2-thiol với các α -cloaxetanilit thể và đã xác định được là, tùy theo điều kiện tiến hành, phản ứng có thể tạo thành hai sản phẩm khác nhau là 2-(N-arylcacboxamidomethylthio)-5-(axetamidoaryl)-1,3,4-oxadiazol, hoặc 2-(arylamino)-5-(axetamidoaryl)-1,3,4-oxadiazol.

- Đã xác định được cơ chế phản ứng giữa 5-(axetamidoaryl)-1,3,4-oxadiazol-2-thiol với các α -cloaxetanilit thể và đã chứng minh được sự chuyển hóa 2-(N-arylcacboxamidomethylthio)-5-(axetamidoaryl)-1,3,4-oxadiazol thành 2-(arylamino)-5-(axetamidoaryl)-1,3,4-oxadiazol là sự chuyển vị nội phân tử kết hợp tách loại.

- Đã nghiên cứu xác định các sản phẩm tổng hợp được bằng các phương pháp Vật lý và Hóa lý hiện đại (phổ IR, NMR và MS). Kết quả cho thấy cấu trúc của các hợp chất phù hợp với dự kiến.

- Đã thử hoạt tính sinh học của một số hợp chất tổng hợp được. Kết quả cho thấy hầu hết các sản phẩm có khả năng diệt vi khuẩn *Gr*(-), *Gr*(+) và chống nấm, trong đó, các hợp chất trong dãy 2-(N-

arylcacboxamidomethylthio)-5-(4'-axetamido-2-bromaryl)-1,3,4-oxadiazol có khả năng chống nấm mốc cao.

12. Khả năng ứng dụng thực tiễn

Thiocacbamoyl hóa hidrarit với tetramethylthiuram disulfua là một trong những phương pháp tốt nhất dùng để tổng hợp các dẫn xuất 1,3,4-oxadiazol-2-thiol. Dẫn xuất 1,3,4-oxadiazol-2-thiol tổng hợp bằng phương pháp này cho hiệu suất cao, giá thành hợp lý đã làm tăng khả năng sử dụng các chất này như tiền chất trong tổng hợp Hữu cơ, đặc biệt là tổng hợp các hợp chất có hoạt tính sinh học.

13. Các hướng nghiên cứu tiếp theo

1. Dựa trên cơ chế đã tìm ra, xây dựng phương pháp mới để tổng hợp các arylamino trên cơ sở phản ứng giữa 1,3,4-oxadiazol-2-thiol với các arylamin trong sự có mặt của xúc tác là các α -cloaxetanilit thể.

2. Thay thế các H trong nhóm SH của các dẫn xuất 1,3,4-oxadiazol-2-thiol bằng các base trong nhóm purin hoặc pyrimidin nhằm tổng hợp các chất tương tự nucleozit có hoạt tính sinh học để thay thế các thuốc chống ung thư và virut.

14. Các công trình công bố liên quan đến luận án

- Lưu Văn Bôi, Nguyễn Thị Sơn, Đào Thị Nhung, Hoàng Đức Quang (2007), "Điều chế và tính chất của 5-[(4-axetamido-2-hidroxi)phenyl]-1,3,4-oxadiazol-2-thiol", *Hội nghị công nghệ và Hoá học Hữu cơ toàn quốc lần thứ IV*, tr. 12-17.

- Lưu Văn Bôi, Nguyễn Thị Sơn, Đào Thị Nhung (2008), "Điều chế và tính chất của 5-(5-axetamido-2-hidroxyphenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-thiol", *Tạp chí Khoa học ĐHQGHN XXIV (1)*, tr. 1-8.

- Nguyễn Thị Sơn, Lưu Văn Bôi, Hà Minh Tú, Đào Việt Trung (2009), " Điều chế và tính chất của 5-[(4-axetamido-2-brom)phenyl]-1,3,4-oxadiazol-2-thiol", *Tạp chí Hoá học và Ứng dụng* 9, tr. 45-48.

- Nguyễn Thị Sơn, Lưu Văn Bôi, Nguyễn Thị Hường, Hà Minh Tú (2009), "Tổng hợp và chuyển hóa 5-(4-axetamidophenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-thiol", *Tạp chí Hoá học* 47, tr. 180-184.

- Nguyễn Thị Sơn, Hà Minh Tú, Lưu Văn Bôi (2011), "Điều chế và tính chất của 5-(4-axetamido-2-cloaryl)-1,3,4-oxadiazol-2-thiol", *Tạp chí hoá học* 49(1), tr. 25-30.

- Lưu Văn Bôi, Trịnh Thái Hà, Nguyễn Thị Sơn, Hà Minh Tú (2011) ,"Điều chế và tính chất của 5-[(3-axetamido-4-metylphenyl)-1,3,4-oxadiazol-2-thiol", *Tạp chí Khoa học ĐHQGHN* 27(3), tr. 145-153.