

NGHIÊN CỨU TỔNG HỢP VÀ TÍNH CHẤT CỦA CÁC GLYCOPYRANOSYL THIOSEMICARBAZON CHỨA VÒNG THƠM

1. Họ và tên nghiên cứu sinh: LÊ THẾ HOÀI
2. Giới tính: Nam
3. Ngày sinh: 05/09/1981
4. Nơi sinh: Thanh Hóa
5. Quyết định công nhận nghiên cứu sinh: số 1691/SĐH ngày 07/05/2009 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: " Nghiên cứu tổng hợp và tính chất của các glycopyranosyl thiosemicarbazon chứa vòng thơm ".
8. Chuyên ngành: Hóa hữu cơ
9. Mã số: 62 44 27 01
10. Cán bộ hướng dẫn khoa học: PGS.TS Nguyễn Đình Thành
11. Tóm tắt các kết quả mới của luận án:
 - + Đã tổng hợp được hai N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-glycopyranosyl)-thiosemicacbazid từ 2,3,4,6-tetra-O-acetyl- α -D-glycopyranosyl và 2,3,4,6-tetra-O-acetyl- α -D-galactopyranosyl isothioxyanat tương ứng bằng phản ứng với hydrazin hydrat.
 - + Từ N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-glycopyranosyl) thiosemicacbazid đã tổng hợp được 17 acetophenon N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-glycopyranosyl)-thiosemicarbazon thể và 10 benzaldehyd N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-glycopyranosyl)thiosemicarbazon thể.
 - + Từ N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-galactopyranosyl)thiosemicacbazid đã tổng hợp được 7 acetophenon N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-galactopyranosyl)-thiosemicarbazon thể và 21 benzaldehyd N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-galactopyranosyl)thiosemicarbazon thể.
 - + Từ các hợp chất N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-glycopyranosyl)-thiosemicarbazon của acetophenon và benzaldehyd thể đã tổng hợp được 20 hợp chất 2-iminothiazolidin-4-on bằng phản ứng với ethyl bromoacetat theo phương pháp tổng hợp nhờ lò vi sóng.
 - + Đã tổng hợp được 5 hợp chất 4,5-dihydrothiazole và 6 hợp chất 2,3-dihydrothiazole và bằng phản ứng của benzaldehyd N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-glycopyranosyl)thiosemicarbazon thể với anhydrid aceic và ω -bromoacetophenon tương ứng.
 - + Cấu trúc của các hợp chất đã tổng hợp được xác nhận bằng các phương pháp phổ hiện đại như phổ IR, phổ

NMR (^1H NMR, ^{13}C NMR) kết hợp kĩ thuật phổ hai chiều (COSY, HSQC và HMBC) và phổ MS.

+ Đã tiến hành thăm dò hoạt tính sinh học của các hợp chất đã tổng hợp. Cụ thể: Đã thử hoạt tính sinh học của 13 hợp chất acetophenon N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-glucopyranosyl)thiosemicarbazon thể. Hầu hết các dẫn xuất thiosemicarbazon này đều thể hiện hoạt tính kháng trực khuẩn Gram(-) Echerichia coli, cầu khuẩn Gram(+) Staphylococcus epidermidis và nấm men Candida albicans. Đã thăm dò hoạt tính bắt gốc tự do DPPH của các N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-galactopyranosyl)thiosemicarbazon của acetophenon thể. Đã thử hoạt tính sinh học của các N-(2,3,4,6-tetra-O-acetyl- β -D-galactopyranosyl)thiosemicarbazon của benzaldehyd thể và nhận thấy rằng phần lớn các hợp chất này đều thể hiện hoạt tính ức chế vi khuẩn Gram(+), Gram(-) và nấm men. Các chất tổng hợp đều thể hiện khả năng bắt gốc tự do DPPH, có ý nghĩa chống oxy hóa. Trong đó dẫn xuất thể $\text{N}(\text{CH}_3)_2$, 3-OMe-4-OH, và 3-OEt-4-OH thể hiện hoạt tính tốt hơn cả chất chuẩn resveratrol.

+ Đã nhận thấy mối tương quan tuyến tính giữa hằng số nhóm thế Hammett (σ) và độ dịch chuyển hóa học carbon-13 của nguyên tử carbon ở liên kết imin trên các hợp chất 2-iminothiazolidin-4-on.

12. Khả năng ứng dụng thực tiễn: Không

13. Các hướng nghiên cứu tiếp theo: Không

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

1. Nguyen Dinh Thanh, Le The Hoai, Nguyen Thi Kim Giang, Nguyen Thi Thu Huong (2010), "Synthesis and conversion of acetophenone per-O-acetyl- β -D-glucopyranosyl thiosemicarbazones", Tạp chí Hoá học 48(4B), tr. 121–128.
2. Nguyen Dinh Thanh, Nguyen Thi Kim Giang, Le The Hoai (2010), "Microwave-assisted synthesis of acetophenone (per-O-acetylated- β -D-glucopyranosyl)-thiosemicarbazones", E-J. Chem. 7(3), pp. 899–907
3. Nguyen Dinh Thanh, Bui Thi Thu Trang, Le The Hoai (2010), "Contribution to synthesis of peracetylated galactopyranosyl thiosemicarbazones of substituted benzaldehydes", Tạp chí Khoa học và Công nghệ 48(2A), tr. 347–354
4. Nguyen Dinh Thanh, Le The Hoai (2011), "NMR spectra of tetra-O-acetyl- β -D-galactopyranosyl thiosemicarbazones", Tạp chí Hoá học 49(2ABC), tr. 640–645
5. Thanh Dinh Nguyen and Hoai The Le (2011), "Some conversions of per-O-acetyl- β -D-glycopyranosyl thiosemicarbazones of substituted acetophenones and benzaldehydes", In Proceedings of the 15th Int. Electron. Conf. Synth. Org. Chem., 1-30 November 2011; Sciforum Electronic Conferences Series , A778.
6. Nguyen Dinh Thanh, Le The Hoai (2012), "Synthesis, structure and antioxidant activity of (tetra-O-acetyl- β -D-galactopyranosyl) thiosemicarbazones of substituted benzaldehydes", Indian J. Pharm. Sci. 74(1), pp. 54–62