

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0423U100213

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-11-2023

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шупенюк Василь Ігорович

2. Basil I. Shupeniuk

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.03

Назва наукової спеціальності: Органічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 10-11-2023

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника

Код за ЄДРПОУ: 02125266

Місцезнаходження: вул. Шевченка, буд. 57, Івано-Франківськ, 76018, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 35. 052. 01

**Повне найменування юридичної особи:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

### **IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію**

**Повне найменування юридичної особи:** Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника

**Код за ЄДРПОУ:** 02125266

**Місцезнаходження:** вул. Шевченка, буд. 57, Івано-Франківськ, 76018, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:** Українська

**Коди тематичних рубрик:** 31.21

**Тема дисертації:**

1. Синтез триазенів на основі 4-заміщених похідних 9,10-антрахінону
2. Synthesis and properties of triazenes based on 4-substituted 9,10-anthracenedione derivatives

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена розробленню ефективних шляхів синтезу 4-заміщених похідних 9,10-антрацендіону та вивченню їх властивостей. Ці сполуки є амінопохідними різної природи, тому їм притаманний широкий спектр біологічної дії, а також достатня реакційна здатність. В роботі синтезовано триазени антрацендіонового ряду, які, зокрема, в своєму складі містять гетероцикл (імідазол) та аліфатичний амін (моноетаноламін), що за попереднім прогнозом онлайн програми PASS вказує на їх високу біологічну активність. Було вивчено властивості отриманих 4-заміщених похідних 9,10-антрацендіону та триазенів на їх основі та запропоновано шляхи їх застосування. Детально досліджено кислотно-основні перетворення діазопохідних антрахінонового ряду. Запропоновано ефективний спосіб одержання триазолів, який ґрунтується на застосуванні внутрішньої циклізації ціанометилантрацендіонової триазени в умовах реакції Дімрота. Наведені шляхи синтезу нових та деяких відомих 4-заміщених похідних 9,10-антрацендіону та досліджено їх будову. Проведено реакцію десульфування 1-аміно-4-[(2-гідроксіетил)аміно]антрацен-9,10-

діону та отримано нові гетероциклічні сполуки антрапіримідини. Досліджено та розраховано константи швидкості ізомеризації, розкладу та кислотності 9,10-антрацендіон-1-діазонію як модельної сполуки антрацендіонового ряду. Наведений синтез 4-заміщених 9,10-антрацендіонових триазенів та досліджено їх властивості, зокрема, описано отримання триазолів. Підібрано оптимальний спосіб (метод Вольмера-Вебера) нанесення триазенів антрацендіонової серії на кремнієву підкладку для одержання плівок нанометрового розміру. Плівки отримували методом випаровування розчину антрацендіону і кристалізації плівки на підкладку за різних температур. Віртуальним скринінгом спрогнозована достатня спорідненість антрацендіонових структур в активному центрі зв'язування з основною протеазою COVID-19.

2. The dissertation work is devoted to the development of effective ways of synthesis of 4-substituted 9,10-anthracenedione derivatives and the study of their properties. These compounds contain amino derivatives of various nature, therefore they have a wide spectrum of biological action, as well as sufficient reactivity. The work synthesized triazenes of the anthracenedione series, which, in particular, contain a heterocycle (imidazole) and an aliphatic amine (monoethanolamine) in their composition, which, according to the preliminary forecast of the PASS online program, indicates their high biological activity. The properties of the obtained 4-substituted derivatives of 9,10-anthracenedione and triazenes based on them were studied and ways of their application were proposed. The acid-base transformations of diazo derivatives of the anthraquinone series were studied in detail. An effective method of obtaining triazoles is proposed, which is based on the application of internal cyclization of cyanomethylantracenedione triazenes under the conditions of the Dimrot reaction. The ways of synthesis of new and some known 4-substituted derivatives of 9,10-anthracenedione are given, and their structure is investigated. A desulfation reaction 1-amino-4-[(2-hydroxyethyl)amino]anthracene-9,10-dione was carried out and new anthrapyrimidine heterocyclic compounds were obtained. The rate constants of isomerization, decomposition, and acidity of 9,10-anthracenedione-1-diazonium as a model compound of the anthracenedione series were studied and calculated. The synthesis of 4-substituted 9,10-anthracenedione triazenes is presented and their properties are investigated, in particular, the preparation of triazoles is described. The optimal method (Volmer-Weber method) of applying triazenes of the anthracenedione series to a silicon substrate for obtaining nanometer-sized films was selected. The films were obtained by the method of evaporation of the anthracenedione solution and crystallization of the film on the substrate at different temperatures. Virtual screening predicted sufficient affinity of anthracenedione structures in the active site of the binding site to the main protease of COVID-19.

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:** Нові речовини і матеріали

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:** Впровадження нових технологій та обладнання для якісного медичного обслуговування, лікування, фармацевтики

**Підсумки дослідження:** Нове вирішення актуального наукового завдання

**Публікації:**

1. Шупенюк В.І. Нуклеофільне заміщення бромом в бромаміновій кислоті / В.І. Шупенюк, Т.М. Тарас, Л.Д. Болібрux // Вісник національного ун-ту «Львівська політехніка». – 2016. – № 841. – С. 264–270.
2. Про особливості діазотування амінопохідних 9,10-антрахінону / В.І. Шупенюк, Ю.І. Дейчаківський, Т.М. Тарас, Л.Д. Болібрux, І.І. Губицька // Вісник національного ун-ту «Львівська політехніка». – 2017. – № 868. – С. 186–195.
3. Взаємозв'язок між структурою і активністю синтезованих триазенів ряду 4-заміщеного 9,10-антрахінону / В.І. Шупенюк, Т.М. Тарас, Л.Д. Болібрux, Л.Р. Журахівська, І.І. Губицька // Вісник національного ун-ту «Львівська політехніка». – 2018. – № 886. – С. 136–146.
4. Особливості отримання триазенів антрахінонового ряду / Т.М. Тарас, Ю.І. Дейчаківський, В.І. Шупенюк, О.П. Сабадах, Л.Д. Болібрux // Хімія, технологія речовин та їх застосування. – 2019. – Vol. 2, № 1. – С. 92–96. <https://doi.org/10.23939/ctas2019.01.092>

- 5. Триазени на основі 4-імідазол заміщеного антрахінону як імовірні інгібітори білків / В.І. Шупенюк, Т.М. Тарас, О.П. Сабадах, Л.Д. Болібрух, Л.Р. Журахівська // Хімія, технологія речовин та їх застосування. – 2019. – Vol. 2, № 2. – С. 135–141. <https://doi.org/10.23939/ctas2019.02.135>
- 6. Синтез та прогнозування біологічної активності 4-заміщених похідних 9,10-антрахінону / Т.М. Тарас, Є.Р. Лучкевич, В.І. Шупенюк, О.П. Сабадах, Л.Д. Болібрух, Л.Р. Журахівська // Хімія, технологія речовин та їх застосування. – 2020. – Vol. 3, № 2. – С. 67–72. <https://doi.org/10.23939/ctas2020.02.067>
- 7. Structure and Morphology of Anthraquinone Triazene Films on Silicon Substrate / V.I. Shupeniuk, S.V. Mamykin, T.N. Taras, M.P. Matkivskiy, O.P. Sabadakh, O.M. Matkivskiy // Physics and Chemistry of Solid State. – 2020. – Vol. 21(1). – P. 117–123. DOI: <https://doi.org/10.15330/pcss.21.1.117-123>
- 8. Synthesis some 4-substituted 9,10-anthraquinones / V.I. Shupeniuk, T.N. Taras, O.P. Sabadakh, E.R. Luchkevich, Y. Kornii // French-Ukrainian Journal of Chemistry. – 2020. – Vol. 8(01). – P. 58–65. DOI: <https://doi.org/10.17721/fujcV8I1P58-65>
- 9. Методи синтезу похідних гідроксиантрахінону та їх біологічна активність / В.І. Шупенюк, Т.М. Тарас, О.П. Сабадах, Є.Р. Лучкевич, М.П. Матківський // Journal of Chemistry and Technologies. – 2021. – Vol. 29(2). – P. 219–231. doi: 10.15421/jchemtech.v29i2.225941
- 10. In-silico study of anthraquinone derivatives as probable inhibitors of COVID-19 / V.I. Shupeniuk, A. Nepolraj, T.N. Taras, O.P. Sabadakh, M.P. Matkivskiy, E.R. Luchkevich // Journal of Chemistry and Technologies. – 2022. – Vol. 30(2). – P. 151–158. DOI: <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v30i2.244728>
- 11. Synthesis and antimicrobial activity of nitrogen-containing anthraquinone derivatives / V.I. Shupeniuk, T.N. Taras, O.P. Sabadakh, E.R. Luchkevich, M.P. Matkivskiy, R.V. Kutsyk // Iraqi Journal of Pharmaceutical Sciences – 2022. – Vol. 31(2). – P. 193–201. DOI: <https://doi.org/10.31351/vol31iss2pp193-201>
- 12. Патент 126814 Україна, МПК 2018.01 C07C 245/00, C07D 231/22 (2006.01) Спосіб отримання триазенів ряду 4-заміщеного 9,10 – антрахінону / Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Лучкевич Є.Р., Дейчаківський Ю.І. // Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника. – № 126814; заявл. 04.01.2018; опубл. 10.07.2018; Бюл. № 13.
- 13. Шупенюк В.І., Тарас Т.М. Методи нуклеофільного заміщення бром у бромаміновій кислоті різними видами амінів // Збірник тез доповідей Десятої Української наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю «Хімічні проблеми сьогодення» м. Вінниця, 27–29 березня 2017 р. – Вінниця: Донецький національний університет імені Василя Стуса – 2017 – С. 143.
- 14. Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Олексюк Г.І. Синтез триазенів на основі 1-аміно-4-[(2-гідроксіетил)аміно]-антрахінон-2-сульфокислоти // Збірка тез доповідей XVIII Міжнародної конференції студентів та аспірантів «Сучасні проблеми хімії» м. Київ 17-19 травня 2017 р. – Київ: Київський національний університет імені Тараса Шевченка – 2017 – С. 125.
- 15. Тарас Т.М., Шупенюк В.І., Дейчаківський Ю.І. Синтез триазенів на основі 4-заміщених 9,10-антрахінонів // Матеріали VII Української конференції «Домбровські хімічні читання-2017» м. Яремче, 12–16 вересня 2017 р. – С. 83.
- 16. Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Олексюк Г.І. Моделювання структури 4-заміщеного 9,10-антрахінону в залежності від розрахунку біологічної активності // Збірник тез доповідей I Міжнародної (XI Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення» м. Вінниця, 27–29 березня 2018 р. – Вінниця: Донецький національний університет імені Василя Стуса – 2018 – С. 171.
- 17. Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Сабадах О.П., Дейчаківський Ю.І. Дослідження біологічної активності синтезованих триазенів ряду 9,10-антрахінону // Збірка тез доповідей XIX Міжнародної конференції студентів та аспірантів «Сучасні проблеми хімії» м. Київ 22-24 травня 2018 р. – Київ: Київський національний університет імені Тараса Шевченка – 2018 – С. 101.
- 18. Пташник Ю.Р., Тарас Т.М., Лучкевич Є.Р., Сабадах О.П., Шупенюк В.І. Кислото-основні властивості антрахінон-1-діазонію // Збірник тез доповідей II Міжнародної (XII Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення» м. Вінниця, 19–21 березня 2019 р.

- Вінниця: Донецький національний університет імені Василя Стуса – 2019 – С. 98.
- 19. Куротчин М.Р., Тарас Т.М., Лучкевич Є.Р., Жолобюк Г.В., Шупенюк В.І. Кислотні-основні властивості 4-бром-1-діазоніо-9,10-антрахінон-2-сульфонатної кислоти // Збірник тез доповідей XI Української наукової конференції студентів та аспірантів «Хімічні Каразинські читання» м. Харків, 22-24 квітня 2019 р. – Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна – 2019 – С. 88-89.
  - 20. Tsikalyak I.V., Shupeniuk V.I., Taras T.M., Luchkevych Y.R., Matkivskiy M.P. Synthesis of triazenes based on bromaminic acid // Book of abstracts XX International conference for students and PhD students «modern chemistry problems» Kyiv 15-17 May 2019 p. – The Faculty of Chemistry of Taras Shevchenko National University of Kyiv – 2019 – С. 136.
  - 21. Тарас Т.М., Шупенюк В.І., Лучкевич Є.Р., Сабадах О.П. Створення бібліотеки біологічно активних сполук антрацендіонового ряду та їх структурний зв'язок // Матеріали XXV Української конференції з органічної та біоорганічної хімії м. Луцьк, 16-20 вересня 2019 р. – С. 156.
  - 22. Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Сабадах О.П., Лучкевич Є.Р., Матківський М.П., Сірадчук Ю.Р. Визначення констант кислотності антрахінондіазонію // Матеріали IV Всеукраїнської наукової конференції «Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів» м. Дніпро, 10 квітня 2020 р. – С. 203-206.
  - 23. Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Сабадах О.П., Лучкевич Є.Р., Матківський М.П., Храбатин Ю.А. Визначення антимікробної активності 4-заміщених похідних 9,10-антрацендіону // Матеріали V Всеукраїнської наукової конференції «Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів» м. Дніпро, 10 квітня 2021 р. – С. 142-144.
  - 24. Храбатин Ю.А., Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Лучкевич Є.Р., Сабадах О.П. Дослідження реакційної здатності антрахінонових триазенів // Збірник тез доповідей XIII Української наукової конференції студентів та аспірантів «Хімічні Каразинські читання» м. Харків, 20-21 квітня 2021 р. – Харків: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна – 2021 – С. 96.
  - 25. Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Сабадах О.П., Лучкевич Є.Р., Матківський М.П. Нуклеофільне заміщення бром антрахінонових похідних // Матеріали I Міжнародної наукової конференції «Актуальні проблеми хімії, матеріалознавства та екології» м. Луцьк, 12-14 травня 2021 р. – С. 63-64.
  - 26. Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Сабадах О.П., Amaladoss Nepalraj. Синтез і властивості 4-заміщених антрахінонових похідних // Записки української науково-дослідницької асоціації: тези доповідей Всеукраїнської конференції наукових дослідників (Львів, 19-25 вересня 2021 року). – Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2021. – 50 с.
  - 27. Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Сабадах О.П., Лучкевич Є.Р., Матківський М.П., Лесик Р.Б. Антрахінонові триазени і похідні на їх основі // Матеріали II Міжнародної наукової конференції «Актуальні проблеми хімії, матеріалознавства та екології» м. Луцьк, 1-3 червня 2022 р. – С. 25.

**Наукова (науково-технічна) продукція:** нові речовини для якісного медичного обслуговування, лікування, фармацевтики

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

**Охоронні документи на ОПВ:**

Винаходи, корисні моделі, промислові зразки

Патент 126814 Україна, МПК 2018.01 C07C 245/00, C07D 231/22 (2006.01) Спосіб отримання триазенів ряду 4-заміщеного 9,10 – антрахінону / Шупенюк В.І., Тарас Т.М., Лучкевич Є.Р., Дейчаківський Ю.І. // Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника. – № 126814; заявл. 04.01.2018; опубл. 10.07.2018; Бюл. № 13.

**Впровадження результатів дисертації:** Планується до впровадження

## VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

### Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тарас Тетяна Миколаївна
2. Tatyana M. Taras

**Кваліфікація:** к. х. н., доц., 02.00.03

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

### Додаткова інформація:

**Повне найменування юридичної особи:** Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника

**Код за ЄДРПОУ:** 02125266

**Місцезнаходження:** вул. Шевченка, буд. 57, Івано-Франківськ, 76018, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

## VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

### Офіційні опоненти

### Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Богза Сергій Леонідович
2. Sergii Bohza

**Кваліфікація:** д. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.03

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

### Додаткова інформація:

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут органічної хімії Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417325

**Місцезнаходження:** вул. Академіка Кухаря, буд. 5, Київ, 02094, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

### Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гевусь Орест Іванович

2. Orest Hevus

**Кваліфікація:** д. х. н., 02.00.03

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

**Рецензенти**

### **VIII. Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Братичак Михайло Миколайвич

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Лубенець Віра Ільківна

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

Будішевська Ольга Григорівна

**Реєстратор**

УкрІНТЕІ

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна