Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U100276

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-03-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сливка Михайло Васильович

2. Slyvka Mykhailo V.

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 18-03-2021

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик:

Тема дисертації:

1. Стратегія електрофільної гетероциклізації в синтезі конденсованих та функціональних похідних 4,5-дизаміщених-1,2,4-триазол-3-тіону

2. The strategy of electrophilic heterocyclization in the synthesis of condensed and functional derivatives of 4,5-disubstituted-1,2,4-triazol-3-thione

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена вирішенню важливої наукової проблеми регіонаправленого дизайну конденсованих і функціональних похідних 1,2,4-триазол-3-тіону з використанням стратегії ЕВЦ. Синтезовано 4-алкенілзаміщені 5-аміно-1,2,4-триазол-3-тіону та бутенільні, цинамілові й пентенільні тіоетери 4,5-дизаміщених 3-меркапто-1,2,4-триазолів. Знайдено оптимальні умови взаємодії 3-[S-алкеніл(алкініл)]-4,5-дизаміщених 1,2,4-триазолів з електрофільними реагентами, які дозволяють досягти максимальної регіо-(стерео-)-селективності процесу. Виявлено закономірності селективного анелювання п’яти- чи шестичленного циклу до остову 1,2,4-триазолу; з’ясовано вплив природи реагуючих компонентів, природи розчинника та умов проведення реакції на регіонаправленість процесу. Показано вирішальний вплив

природи алкенільного фрагмента та гетероатома, зв'язаного з ненасиченим замісником, на регіонаправленість ЕВЦ. Запропоновано механізми перебігу реакцій ЕВЦ досліджуваних ненасичених похідних 1,2,4-триазол-3-тіону на основі одержаного емпіричного матеріалу та методів комп'ютерного моделювання. Показано ефективність використання 13С ЯМР спектроскопії для контролю регіоселективності реакцій ЕВЦ. Розроблено ефективний метод функціоналізації триазольного циклу шляхом селективного розкриття тіазолінієвого кільця у солях тіазоло[3,2-b][1,2,4]триазолію при дії нуклеофілів. Показано можливість комплексоутворення карбонілзаміщених триазолів із іонами Ni2+, Zn2+, Cu2+, Bi3+. Досліджено біологічні властивості селено- й телуровмісних тіазоло[3,2-b][1,2,4]триазолів й тіазоло[2,3-c][1,2,4]триазолів; виявлено сполуки-лідери, які проявляють високу бактерицидну, фунгіцидну, протитуберкульозну активності.

2. The use of the electrophilic intramolecular cyclization (EIC) strategy for annulation of an additional heterocycle is an inexhaustible source of synthetic heterocycle design, and its research with a view to synthesizing condensed and functional symmetric triazoles is both relevant and of theoretical and practical importance. The dissertation is devoted to the development of new methods of obtaining condensed and functional derivatives of 1,2,4-triazole-3-thione via using the IEC strategy. To achieve the goal of dissertation the following tasks have been solved: (1) the methods for obtaining model functionally substituted 1,2,4-triazole-3-thiones were developed, which contain an unsaturated moiety suitable for carrying out EIC reactions; (2) the interaction of electrophilic reagents (iodine, iodine bromide, bromine, acids, selenium (IV) chlorides, selenium (IV) bromides, tellurium (IV) chlorides, tellurium (IV) bromides) with unsaturated derivatives of functionally substituted 1,2,4-triazole-3-thiones were studied; (3) the regioselectivity of annulation of an additional heterocycle to the 1,2,4-triazole backbone and to identify factors that influence the realization of the EIC process was investigated; (4) the optimal conditions for obtaining the target annulation products by the EIC method were found; (5) the energy-saving methods for the synthesis of condensed 1,2,4-triazoles that meet the requirements of green chemistry were developed; (6) the probable mechanisms of EIC on model unsaturated 1,2,4-triazole derivatives was found out; (7) the chemical properties of condensed 1,2,4-triazole derivatives in order to further functionalize symmetric triazoles were investigated; (8) the biological properties of new condensed and functional derivatives of 1,2,4-triazole were studied. In the dissertation the 4-alkenyl substituted 5-amino-1,2,4-triazole-3-thione and butenyl, cinnamyl and pentenyl thioethers of 4,5-disubstituted 3-mercapto-1,2,4-triazoles have firstly been synthesized. The factors of influence on the stability of unsaturated aroylbisthioureas and their conversion to model 4-aroyl-5-amino-1,2,4-triazol-3-thion have been investigated for the first time. The optimal conditions for the interaction of unsaturated 1,2,4-triazole-3-thione derivatives with electrophilic reagents have been found, which allow to achieve maximum regio- (stereo-)-selectivity of the process. The patterns of selective annulation of a five- or six-membered cycle to the backbone of 1,2,4-triazole have been identified; the influence of the nature of the reacting components, the nature of the solvent and the conditions of the reaction on the regiodirection of the process are investigated. For the first time, the decisive influence of the nature of the alkenyl moiety and the heteroatom linked to the unsaturated substituent on the regiodirection of the EIC is shown. The mechanisms for the course of EIC reactions of the unsaturated 1,2,4-triazol-3-thione derivatives have been proposed, based on the empirical material obtained and the methods of computer simulation. The efficiency of using 13C NMR spectroscopy in the analysis of the EIC regioselectivity has been shown. A series of convenient techniques for the introduction of selenium trihalide and tellurium-trihalide fragment into the thiazolo[3,2-b][1,2,4]triazoles and thiazolo[2,3-c][1,2,4]triazoles have been developed vie EIC based using low-toxic solvents, available reagents and meeting the criteria of green chemistry. An effective method for the functionalization of the triazole cycle has been elaborated via selectively opening the thiazolinium ring in the thiazolo[3,2-b][1,2,4]triazolium salts under the action of nucleophilic reagents; the optimal process conditions have been determined depending on the structure of the source salts – this made it possible to obtain the inaccessible polyfunctional 1,2,4-triazoles. The optimal conditions for the action of nucleophilic reagents on halogenation products have been established; the regiodirection of the process was determined depending on the nature of the nucleophile. A convenient way of functionalizing of thiazolo[3,2-b][1,2,4] triazoles by elimination and nucleophilic substitution reactions has been developed. Preparative techniques for introducing of functional

groups into the second position of the 1,2,4-triazole cycle have been developed via the dithiocarbonation reaction, and the Mannih reaction – as result, the promising bioactive and analytical reagents containing 1,2,4-triazole ring were received.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сливка Михайло Васильович
2. Slivka Mykhailo Vasyliovich

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сливка Михайло Васильович
2. Slyvka Mykhajlo Vasyl'ovych

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Походило Назарій Тарасович
2. Pokhodylo Nazarii T.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ліпсон Вікторія Вікторівна
2. Lipson Viktoria V.

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Вовк Михайло Володимирович

2. Vovk Mykhailo V.

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Дорошенко Андрій Олегович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Дорошенко Андрій Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.