

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0822U100906

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-08-2022

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тупичак Микола Анатолійович

2. Turychak Mykola Anatoliiovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 23-08-2022

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, 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):** ДФ 35.051.061

**Повне найменування юридичної особи:** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, 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:** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

**Форма власності:**

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

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.21

**Тема дисертації:**

- 1,3-Диполярні реагенти у синтезі азолів
2. 1,3-Dipolar reagents in the synthesis of azoles

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена розробці нових варіантів реакцій 1,3-диполярного циклоприєднання, поєднанню реакції 1,3-диполярного циклоприєднання у тандеми з іншими хімічними перетвореннями для отримання нових азолів та їх конденсованих похідних з корисними властивостями, а також вивченню властивостей отриманих сполук. Основна увага у роботі зосереджена на опрацюванні нових напрямів використання органічних азидів як ефективних 1,3-диполів у реакціях [3+2]-циклоприєднання, синтезі 1,2,3-триазолів та їхніх конденсованих похідних, а також вивченні поведінки альтернативних азидам 1,3-диполів у таких перетвореннях. Вперше досліджено 3-(метилсульфоніл)проп-1-ин та 2-(проп-2-ин-1-ілокси)-6Н-бензо[с]хромен-6-он в CuAAC-реакції. З'ясовані особливості взаємодії ди(проп-2-ин-1-іл)аміну з арилазидами та синтезовано нові біс-триазоли. Одержано раніше неописані кон'югати 1,2,3-триазолу і 6Н-бензо[с]хромен-6-ону та досліджено їх протиракову активність. Встановлено, що продукти галогенарилування акрилатів за реакцією Меєрвейна є зручними реагентами для синтезу 2-азидо-3-арилпропанових кислот. Виходячи з 2-азидо-3-арилпропанових кислот, розроблено методи отримання 2-

(1H-1,2,3-триазол-1-іл)-3-арилпропанових кислот та їхніх похідних, а також 4,5,6,7-тетрагідро-[1,2,3]триазоло[1,5-а]піразинів. Запропоновано новий підхід до синтезу заміщених [1,2,3]триазоло[1,5-а]піразинів шляхом поєднання чотирикомпонентної реакції Угі та некаталітичної циклізації Х'юсена, що дозволяє отримувати цільові продукти з високими виходами без застосування каталізаторів. Описано новий приклад клік-реакції гідразонілгалогенідів з метиленактивними нітрилами. З'ясовано, що нітриліміни є високореакційноздатними реагентами у взаємодії з метиленактивними нітрилами, та можуть бути застосовані у синтезі як альтернативні азидам 1,3-диполі, для ізостерних замінь 1,2,3-триазольного циклу 1H-піразольним, що розширює синтетичні можливості розроблених методів, зокрема для скринінгу на біологічну активність одержаних сполук. Отримано раніше неописані 4-(1,2,4-оксазол-5-іл)-5-аміно-1H-піразоли та 4-(1,2,4-оксазол-5-іл)-5-аміно-1H-1,2,3-триазоли. Показано, що взаємодія 3-(1H-пірол-2-іл)/(1H-індол-3-іл)-3-оксопропанонітрилів з нітрилімінами відбувається регіоселективно з утворенням 5-амінопіразолів. Розроблено доміно-реакцію, в якій 2-амінотіофен-3-карбоксилати чи 2-(2-(1-хлоро-2-етокси-2-оксоетиліден)гідразиніл)тіофен-3-карбоксилати взаємодіють з 2-(3-арил-1,2,4-оксадіазол-5-іл)ацетонітрилами з утворенням тіено[3,2-е][1,2,3]триазоло[1,5-а]піримідин-5(4H)-онів та піразоло[1,5-а]тіено[3,2-е]піримідин-5(4H)-онів.

2. This dissertation is focused on the development of new variants of 1,3-dipolar cycloaddition reactions. It also explores a combination of 1,3-dipolar cycloaddition in tandem with other chemical transformations in order to obtain new azoles and their condensed derivatives with useful properties, and study of the properties of the obtained compounds. The main focus of the work is on the development of new directions for the use of organic azides as effective 1,3-dipoles in [3+2]cycloaddition reactions, synthesis of 1,2,3-triazoles and their condensed derivatives, as well as studying the behaviour of alternative azides 1,3-dipoles in such transformations. 3-(Methylsulfonyl)prop-1-yne and 2-(prop-2-yn-1-yloxy)-6H-benzo[c]chromen-6-one were investigated for the first time in the CuAAC reaction. The peculiarities of the interaction of di(prop-2-yn-1-yl)amine with aryl azides have been elucidated and new bis-triazoles were synthesized. Previously undescribed conjugates of 1,2,3-triazole and 6H-benzo[c]chromen-6-one were obtained and their anticancer activity was investigated. The haloarylation products of acrylates by the Meerwein reaction, which were obtained from commercially available starting compounds, are convenient reagents for the synthesis of 2-azido-3-arylpropanoic acids. Methods for the preparation of 2-(1H-1,2,3-triazol-1-yl)-3-arylpropanoic acids and their derivatives as well as 4,5,6,7-tetrahydro-[1,2,3]triazolo[1,5-a]pyrazines were developed on the basis of 2-azido-3-arylpropanoic acids. A new approach to the synthesis of substituted [1,2,3]triazolo[1,5-a]pyrazines by combining a four-component Ugi reaction and non-catalytic Huisgen cyclization was proposed, which allows to obtain high-yield target products without the use of catalysts. A new example of the click reaction of hydrazonyl halides with active methylene nitriles is described. It was found that nitrileimines are highly reactive reagents in the interaction with active methylene nitriles, and can be used in the synthesis as alternatives to 1,3-dipole azides, for isostere substitutions of 1,2,3-triazole ring by 1H-pyrazole, which expands the synthetic capabilities of the developed methods, in particular, for screening for the biological activity of the obtained compounds. The 4-(1,2,4-oxazol-5-yl)-5-amino-1H-pyrazoles and 4-(1,2,4-oxazol-5-yl)-5-amino-1H-1,2,3-triazoles, which were not described previously, were obtained. It is shown that the interaction of 3-(1H-pyrrol-2-yl)/(1H-indol-3-yl)-3-oxopropanonitrile with nitrileimines occurs regioselectively with the formation of 5-aminopyrazoles. A domino reaction has been developed in which 2-aminothiophene-3-carboxylates or (2-(1-chloro-2-ethoxy-2-oxoethylidene)hydrazineyl)thiophene-3-carboxylates react with 2-(3-aryl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)acetonitriles with the formation of thieno[3,2-e][1,2,3]triazolo[1,5-a]pyrimidin-5(4H)-ones and pyrazolo[1,5-a]thieno[3,2-e]pyrimidines.

**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. Обушак Микола Дмитрович

2. Obushak Mykola Dmytrovych

**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

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Смолій Олег Борисович

2. Smolii Oleh Borysovych

**Кваліфікація:** д. х. н., 02.00.10

**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. Половкович Святослав Володимирович
2. Polovkovych Sviatoslav Volodymyrovych

**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****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Біла-Лялька Євгенія Євгенівна
2. Bila-Lialka Yevheniia Yevhenivna

**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. Горак Юрій Ігорович
2. Horak Yurii Ihorovych

**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

## **VIII. Заключні відомості**

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

Павлюк Володимир Васильович

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

Павлюк Володимир Васильович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.