

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U002428

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-05-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кархут Андрій Ігорович

2. Karkhut Andriy I.

Кваліфікація: к. х. н.

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: 06-05-2019

Спеціальність за освітою: Технологія фармацевтичних препаратів

Місце роботи здобувача: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, 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 35.052.01

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, 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: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, 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. Азо-біс-4,6-дихлоро-1,3,5-триазин у реакції Дільса-Альдера
2. Azo-bis-4,6-dichloro-1,3,5-triazine in the Diels-Alder reaction

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена експериментальним та DFT дослідженням реакційної здатності азо-біс-4,6-дихлоро-1,3,5-триазину у реакції Дільса-Альдера та синтезу на його основі нових нітрогеновмісних гетероциклів, встановленню їх хімічних властивостей з метою подальшої модифікації та вивченню біологічної активності одержаних сполук. Досліджено перебіг реакції Дільса-Альдера між азо-біс-ціанурхлоридом та рядом 1,3-дієнів з утворенням відповідних 6,6'-(3,4,5-заміщених-3,6-дигідропіридазин-1,2-диіл)біс(2,4-дихлоро-1,3,5-триазинів), а також з антраценом з утворенням 11,12-триазино-9,10-епідіазаноантрацену. Встановлено умови нуклеофільного заміщення атомів хлору одержаних продуктів. Показано, що у реакції азо-біс-ціанурхлориду з циклогексан-1,3-дієном продукт реакції Дільса-Альдера не утворюється, натомість відбувається приєднання азо-біс-ціанурхлориду та розкриття циклу циклогексадієну з утворенням продукту з гекса-2,5-дієновим ланцюгом – (E)-6,6'-(1-(гекса-2,5-дієн-1-іл)гідразин-1,2-диіл)біс(2,4-дихлоро-1,3,5-триазину). Вперше показано реакційну здатність азо-біс-ціанурхлориду як електронodefіцитного дієну у оберненій реакції Дільса-Альдера. Моделюванням на M06-2X/6-31G(d,p) рівні

встановлено, що реакція з фураном та стиреном відбувається у дві стадії, з початковим утворенням продукту нормальної реакції Дільса-Альдера та його наступним [3,3] сигматропним перегрупуванням у термодинамічно стійкий продукт – один з регіоізомерів формальної оберненої реакції Дільса-Альдера. При взаємодії азо-біс-ціанурхлориду з вінільними сполуками утворення продукту оберненої реакції Дільса-Альдера відбувається в одну стадію. Проведений скринінг антимікробної активності показав, що ряд синтезованих сполук проявляють виражену активність по відношенню до *Staphylococcus aureus*, *Mycobacterium luteum*, *Aspergillus niger* та *Candida tenuis*. Активністю по відношенню до *Escherichia coli* не характеризуються жодна з ряду синтезованих сполук.

2. The dissertation is devoted to the experimental and DFT studies of the reactivity of azo-bis-4,6-dichloro-1,3,5-triazine in the Diels-Alder reaction and the synthesis of new nitrogen-containing heterocycles on its basis, studying their chemical properties for further modification and studying biological activity of the obtained compounds. The Diels-Alder reaction of azo-bis-cyanuric chloride and a series of 1,3-dienes to give the corresponding 6,6'-(3,4,5-substituted-3,6-dihydropyridazine-1,2-diyl)bis(2,4-dichloro-1,3,5-triazines), and with anthracene to form 11,12-triazine-9,10-epidiazanoanthracene was investigated. The conditions of nucleophilic substitution of the obtained products chlorine atoms have been established. It was shown that the interaction of azo-bis-cyanuric chloride with cyclohexane-1,3-diene does not produce the Diels-Alder reaction product, instead of the addition of azo-bis-cyanuric chloride and the disclosure of the cyclohexadienic cycle to form the product with hexa-2,5-diene chain – (E)-6,6'-(1-(hexa-2,5-dien-1-yl)hydrazine-1,2-diyl)bis(2,4-dichloro-1,3,5-triazine). The reactivity of azo-bis-cyanuric chloride as an electron-deficient diene in an IED Diels-Alder reaction was shown. By the modeling on M06-2X/6-31G(d,p) level, it was found that the reaction with furan and styrene proceeds in two stages, with the initial formation of the NED Diels-Alder reaction product and its subsequent [3,3] sigmatropic rearrangement in thermodynamically stable formal IED Diels-Alder reaction product. In the interaction of azo-bis-cyanuric chloride with vinyl compounds, the formation of the IED Diels-Alder reaction product takes place in one step. The screening of antimicrobial activity showed that a number of synthesized compounds have a pronounced activity in relation to *Staphylococcus aureus*, *Mycobacterium luteum*, *Aspergillus niger* and *Candida tenuis*. Any of the synthesized compounds is not characterized by the activity in relation to *Escherichia coli*.

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 ОПВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Марінцова Наталія Геннадіївна

2. Marintsova Nataliia H.

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. Матійчук Василь Степанович

2. Matiichuk Vasyl S.

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. Шермолівч Юрій Григорович.

2. Shermolovych Yurii H.

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**

Воронов Станіслав Андрійович

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

Воронов Станіслав Андрійович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.