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/анотація:

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 електронодефіцитного 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] сігматропним 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 cyclohexadenic 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 ОПІВ:

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. Шермолович 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.