Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U102300

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-09-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лаба Євген-Олег Володимирович

2. Laba Yevhen-Oleh Volodymyrovych

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: 10-09-2021

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 35.051.028

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: 31.21.27

Тема дисертації:

1. Тандемні реакції N-ацилювання–циклоприєднання у конструюванні гетероциклічних систем

2. N-Acylation–cycloaddition tandem reactions in the design of heterocyclic systems

Реферат/анотація:

1. Розроблено тандемні реакції N-ацилювання–циклоприєднання, які дають змогу конструювати похідні ізоіндолу, анельовані з тіофеновим, пірольним, індольним, бензофурановим фрагментами, а також похідні іптицену, фуро[2,3-c]піроло-2,4-діону та фенантридону. Розроблені методи синтезу придатні для створення комбінаторних бібліотек сполук і дослідження їхньої біологічної активності. 3-(2- Чи 3-тієніл)аліламіни ацилювали за аміногрупою малеїновим ангідридом. З'ясували, що у тих же умовах відбувається інтрамолекулярна реакція Дільса-Альдера. Якщо взаємодію між малеїновим ангідридом та тієнілаліламінами проводили за кімнатної температури у діетиловому етері, або при 80°C у бензені, то спостерігали утворення лише продуктів, що містять неароматизоване тіофенове кільце. Натомість, у разі застосування толуолу як розчинника і проведення синтезів при 110°C, процес не зупинився на циклоприєднанні Дільса-Альдера, а супроводжувався прототропним перегрупуванням первинних адуктів у такі, що містять ароматичне тіофенове кільце. Ацилювання тієнілаліламінів заміщеними α,β-ненасиченими ангідридами є регіоселективним. Нуклеофільна атака вторинним атомом азоту відбувається за найбільш стерично

доступною карбонільною групою заміщених малеїнових ангідридів. При цьому утворюються лише неароматизовані адукти за температури нижче 80°С. Натомість, коли температура реакції перевищувала 100°С, спостерігали селективне утворення продуктів з ароматичним тіофеновим циклом. Виявлено, що IMDAV реакція тієнілаліламінів з 2,3-дихлормалеїновим ангідридом відбувається незвично, з елімінуванням лише однієї молекули хлороводню та декарбоксилюванням. Етилфумароїл- та циннамоїлхлориди, хоча і є слабшими дієнофілами порівняно з малеїновим ангідридом, проте також вступають у реакції тандемного ацилювання / IMDAV з тієнілаліламінами. Показана можливість отримання діастереомерно збагачених (de до 87%) тієноізоіндолонів за ретельного контролю температури реакції. Для синтезу гетарилпропеналів на основі піролу, індолу та бензофурану з метою їхнього випробовування у описаній вище синтетичній схемі розроблено методику одержання N,N-диметиламіноакролеїну. Індолопропеніламіни взаємодіють з малеїновим ангідридом і вступають у реакцію таким чином, що спочатку проходить ацилювання за аміногрупою далі відбувається циклоприєднання. Ввести аліламінний фрагмент не у □-, а в □-положення до атома азоту відносно легко можна для похідних піролу. За розробленою процедурою з використанням N,N-диметиламіноакролеїну одержали 1-метил-3-(пірол-2-іл)аліламіни і випробували їх у реакції тандемного ацилювання / IMDAV. Реакція йде добре з високими виходами. З'ясовано, що 3-(бензофуран-2-іл)аліламіни взаємодіють з малеїновим ангідридом у середовищі бензену при кип'ятінні з формуванням гідрованого ізоіндольного фрагменту, внаслідок чого одержали 2-заміщені карбонові кислоти – аналоги гетеролігнанів. Розроблено зручний спосіб одержання нового класу N-заміщених каркасних піролідоноіптиценових гетеросистем. Досліджено каскадний синтез похідних тетрагідро-2Н-фуро[2,3-с]піроло-2,4(3Н)-діону, ключовою стадією якого є ретро-альдольна конденсація. Зважаючи на широке практичне використання фенантридонів та застосовуючи опрацьовану методологію, розроблено зручний метод синтезу ще не досліджених похідних фенантридону.

2. We have developed tandem N-acylation – cycloaddition reactions that make it possible to construct isoindole derivatives annulated with thiophene, pyrrole, indole, and benzofuran fragments. Also methods for preparation of some iptycene, furo[2,3-c]pyrrolo-2,4-dione and phenanthridone derivatives have been disclosed. The developed synthetic methods are suitable for creating combinatorial libraries of compounds and for further studying their biological activity. 3- (2- Or 3-thienyl) allylamines were obtained, which were acylated at the amino group with maleic anhydride. It was found that under the same conditions, an intramolecular Diels-Alder reaction occurs. If the interaction between maleic anhydride and thienylalylamines was carried out at room temperature in diethyl ether or at 80°C in benzene, only products containing a non-aromatic thiophene ring were observed. Instead, in the case of the use of toluene as a solvent and providing synthesis at 110 ° C, the process did not stop at the Diels-Alder stage but was accompanied by prototropic tautomerism of the primary adducts into those containing an aromatic thiophene ring. The acylation of thienylalylamines with substituted □,□-unsaturated anhydrides is regioselective. The nucleophilic attack by a secondary nitrogen atom occurs at the most sterically available carbonyl group of substituted maleic anhydrides. Only non-aromatic adducts are formed at temperatures below 80°C. Instead, when the reaction temperature exceeded 100°C, selective formation of products with an aromatic thiophene ring was observed. It was found that the IMDAV reaction of thienylalylamines with 2,3-dichloromaleic anhydride is unusual. It proceeds with the elimination of only one molecule of hydrogen chloride and decarboxylation. Cinnamoyl and ethyl fumaroyl chlorides, being weaker dienophiles compared to maleic anhydrides, can also be involved in the tandem acylation/IMDA reaction with vinylthiophenes. The possibility of obtaining diastereomerically enriched (de up to 87%) thienoisoindolone with careful control of the reaction temperature is shown. We have studied pyrrole, indole, and benzofuran derivatives in IMDAV reactions. A method for preparing the starting compound N,N-dimethylaminoacrolein was developed. Indolopropenylamines interact with maleic anhydride and react in such a way that the amino group is first acylated, resulting in the formation of intermediates. This is followed by cycloaddition. Also, the allylamine moiety was introduced not in the □- but in the □-position to the nitrogen atom for pyrrole derivatives by the Wilsmeier acrylation reaction. The obtained pyrrolopropenylamines were tested in the intramolecular Diels-Alder reaction. The reaction goes well. The synthetic potential of benzofuran series dienes in the Diels-Alder intramolecular reaction was also disclosed.

Which react with maleic anhydride to form benzofuro[2,3-f]-isoindole-10-carboxylic acid, with high yields. A convenient method, for preparation of a new class of N-substituted framework pyrrolidone-iptycene hetero systems has been developed. The cascade synthesis of tetrahydro-2H-furo[2,3-c]pyrrolo-2,4(3H)-dione derivatives, the key stage of which is retro-aldol condensation, was studied. Methods for the synthesis of phenanthridone derivatives have been developed.

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. Вовк Михайло Володимирович

2. Vovk Mykhailo 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

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. Матійчук Василь Степанович

2. Matiichuk Vasyl Stepanovych

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. Остап'юк Юрій Володимирович
2. Ostapiuk Yurii Volodymyrovych

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 — Походило Назарій Тарасович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні — Походило Назарій Тарасович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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