

# Облікова картка дисертації (ОКД)

Шифр спецради: ДФ 35.051.061

Відкрита

Вид дисертації: 08

Державний обліковий номер: 0822U100906

Дата реєстрації: 29-08-2022



## 1. Відомості про здобувача

ПІБ (укр.): Тупичак Микола Анатолійович

ПІБ (англ.): Turuchak Mykola Anatoliiovych

Шифр спеціальності, за якою відбувся захист: 102

Дата захисту: 23-08-2022

На здобуття наукового ступеня: Доктор філософії (д.філ)

Спеціальність за освітою: Хімія

## 2. Відомості про установу, організацію, у вченій раді якої відбувся захист

Назва організації: Львівський національний університет імені Івана Франка

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ: 02070987

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

Телефон: 380322616048

E-mail: zag\_kan@lnu.edu.ua

WWW: <http://www.lnu.edu.ua>

## 3. Відомості про організацію, де виконувалася (готувалася) дисертація

Назва організації: Львівський національний університет імені Івана Франка

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ: 02070987

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

Телефон: 380322616048

E-mail: zag\_kan@lnu.edu.ua

WWW: <http://www.lnu.edu.ua>

## 4. Відомості про організацію, де працює здобувач

**Назва організації:** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Підпорядкованість:** Міністерство освіти і науки України

**Код ЄДРПОУ:** 02070987

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

**Телефон:** 380322616048

**E-mail:** zag\_kan@lnu.edu.ua

**WWW:** <http://www.lnu.edu.ua>

## 5. Наукові керівники та консультанти

### Наукові керівники

Обушак Микола Дмитрович (д. х. н., професор, 02.00.03)

## 6. Офіційні опоненти та рецензенти

### Офіційні опоненти

Смолій Олег Борисович (д. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.10)

Половкович Святослав Володимирович (д. х. н., доц., 02.00.03)

### Рецензенти

Біла-Лялька Євгенія Євгенівна (к. х. н., доц., 02.00.03)

Горак Юрій Ігорович (к. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.03)

## 7. Підсумки дослідження та кількісні показники

**Підсумки дослідження:** 40 - Нове вирішення актуального наукового завдання

**Кількість публікацій:** 16

**Кількість сторінок:** 208

**Кількість патентів:**

**Кількість додатків:** 3

**Впровадження результатів роботи:**

**Ілюстрації:** 6

**Мова документа:** Українська

**Таблиці:** 11

**Зв'язок з науковими темами:** № 0118U003610, №

**Схеми:** 95

0121U107777, № 2020.01/0166

**Використані першоджерела:** 180

## 8. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

**Індекс УДК:** 547, 547.772.1 + 547.791.1+ 547.791.9

**Тематичні рубрики:** 31.21

## 9. Тема та реферат дисертації

### Тема (укр.)

1,3-Дипольярні реагенти у синтезі азолів

## Тема (англ.)

1,3-Dipolar reagents in the synthesis of azoles

## Реферат (укр.)

Дисертаційна робота присвячена розробці нових варіантів реакцій 1,3-дипольного циклоприєднання, поєднанню реакції 1,3-дипольного циклоприєднання у тандемі 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)-6H-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 6H-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 гідрозонігалогенідів з метиленактивними нітрилами. З'ясовано, що нітриміни є високореакційнодатними реагентами у взаємодії з метиленактивними нітрилами, та можуть бути застосовані у синтезі як альтернативні азидам 1,3-диполі, для ізостерних замінів 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 нітримінами 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 тієно[3,2-е][1,2,3]триазоло[1,5-а]піримідин-5(4H)-онів та піразоло[1,5-а]тієно[3,2-е]піримідин-5(4H)-онів.

## Реферат (англ.)

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)hydrazineylthiophene-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.

---

**Голова спеціалізованої вченої ради:** Павлюк Володимир Васильович (д. х. н., професор, 02.00.01)

**Головуючий на засіданні:** Павлюк Володимир Васильович (д. х. н., професор, 02.00.01)

---

Підпис

М.П.

**Відповідальний за подання документів:** Жак О.В. (Тел.: 380636075982)

---

Підпис

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.