

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U002983

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-09-2024

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Смирнов Олег Костянтинович

2. Oleh K. Smyrnov

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Молекулярний дизайн та синтез

Дата захисту: 04-09-2024

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

III. Відомості про дисертацію

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): 6147

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.23.01, 31.21.17

Тема дисертації:

1. Синтез функціоналізованих похідних трицикло[3.3.0.03,7]октану та його аналогів.
2. Synthesis of functionalized derivatives of tricyclo[3.3.0.03,7]octane and its analogues.

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці методів синтезу похідних трицикло[3.3.0.03,7]октану, дослідженню механістичних аспектів утворення даного структурного елемента, а також вивченню можливостей функціоналізації одержаних сполук. Основним синтетичним результатом досліджень, проведених у рамках дисертаційної роботи, стала розробка мультиграмових препаративних методів синтезу основних білдинг блоків трицикло[3.3.0.03,7]октану (біснорадамантану) та трицикло[3.3.1.02,7]нонану (норадамантану), що стало можливим завдяки фундаментальному дослідженню ключової стадії – внутрішньомолекулярної циклізації біцикло[3.3.0]октан-2,5-дикарбоксилату. Саме завдяки вищезгаданому

всебічному механістичному дослідженню вдалося успішно модифікувати літературну процедуру та синтезувати трицикло[3.3.0.03,7]октан-1,5-дикарбоксилат – ключовий інтермедіат для проведення подальших досліджень. Також було помічено утворення двох різних трициклічних сполук (трицикло[3.3.0.03,7]октану та трицикло[3.3.1.02,7]нонану) та встановлено залежність напрямку перебігу реакції від взаємного розташування замісників біля двох стереоцентрів у вихідній сполуці біцикло[3.3.0]октан-2,5-дикарбоксилату. Для проведення цієї частини дослідження було синтезовано усі три можливі діастереомери диметил(2s,3as,5s,6as)-октагідропентален-2,5-дикарбоксилату (екзо,екзо-, ендо,екзо-, ендо,ендо-ізомери відповідно) та вивчено їхню реакційну здатність в умовах реакції циклізації.

2. The work is devoted to the development of methods for the synthesis of tricyclo[3.3.0.03,7]octane derivatives, the study of mechanistic aspects of the formation of this structural element, as well as the study of the possibilities of functionalization of the obtained compounds. The main synthetic result of the research carried out as part of the dissertation work was the development of multigram preparative methods for the synthesis of the main building blocks and fundamental research of the key stage - cyclization with the formation of tricyclo[3.3.0.03,7]octane structural element (bisoradamantane) and tricyclo[3.3.1.02,7]nonane (noradamantan). Using the approaches known in the literature, the synthesis of tricyclo[3.3.0.03,7]octane-1,5-dicarboxylate was successfully carried out - a key intermediate for further research. A more in-depth study was also conducted to study the dependence of the formation of two different tricyclic compounds (tricyclo[3.3.0.03,7]octane and tricyclo[3.3.1.02,7]nonane) on the mutual location of two stereocenters in the starting compound for the cyclization reaction. To carry out this part of the study, three possible diastereomers of Dimethyl(2s,3as,5s,6as)-octahydropentalene-2,5-dicarboxylate (exo, exo-, endo, exo-, endo, endo-isomers, respectively) were synthesized and their reaction ability was studied under the conditions of the cyclization reaction.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 1. Smyrnov, O. K., Melnykov, K. P., Rusanov, E. B., Suikov, S. Y., Pashenko, O. E., Fokin, A. A., Volochnyuk, D. M., Ryabukhin S. V. (2023). Multigram Synthesis of Dimethyl Stellane-1,5-Dicarboxylate as a Key Precursor for ortho-Benzene Mimics. *Chemistry - A European Journal*, 29(70), e202302454
- 2. Oleh K. Smyrnov, Olexandr Ye. Pashenko Nature-Inspired Tetrahydropentalene Building Blocks: Scalable Synthesis for Medicinal Chemistry. *J. Org. Pharm. Chem.* 2024, 21(4), 44-51.
- 3. Oleh K. Smyrnov, Kostiantyn P. Melnykov, Dr. Olexandr E. Pashenko Dr., Dmytro M. Volochnyuk Prof. Dr., Serhiy V. Ryabukhin Prof., Stellane at the Forefront: Derivatization and Reactivity Studies of a Promising Saturated Bioisostere of orthoSubstituted Benzenes

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рябухін Сергій Вікторович
2. Serhii V. Riabukhin

Кваліфікація: д. х. н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Колодяжна Анастасія Олегівна
2. Anastasiia O. Kolodiazhna

Кваліфікація: д. б. н., старший науковий співробітник, 02.00.10

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Черенок Сергій Олексійович

2. Serhii O. Cherenok

Кваліфікація: к. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 5, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Академічний

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Остапчук Євген Миколайович

2. Yevhen M. Ostapchuk

Кваліфікація: к. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ляпунов Олександр Юрійович

2. Oleksandr Y. Liapunov

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

VIII. Заключні відомості

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

Комаров Ігор Володимирович

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

Комаров Ігор Володимирович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Воронцова Оксана Анатоліївна

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна