

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U005438

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-10-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кордубайло Микита Вадимович

2. Mykyta V. Kordubailo

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8567-9838

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Органічна хімія

Дата захисту: 08-10-2026

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 16928

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

Код за ЄДРПОУ: 05417325

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

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

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

Код за ЄДРПОУ: 05417325

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.21.25.09, 31.21.27.05, 31.21.27.07, 31.21.17

Тема дисертації:

1. Реакція Ларока в синтезі функціоналізованих азаіндолів.
2. The Larock reaction in the synthesis of functionalized azaindoles

Реферат/анотація:

1. Дисертаційну роботу присвячено розробці ефективних методів синтезу 4-,5-,6-,7-азаіндолів, функціоналізованих найбільш поширеними замісниками для потреб медичної хімії, а також синтезу 3-хлоро-7Н-піроло[2,3-с]-піридазину, 3-хлоро-5Н-піроло[3,2-с]піридазину, 3-хлоро-6,7-дигідро-5Н-піроло[2,3-с]піридазину, та дослідженню їх хімічних властивостей. У результаті роботи знайдено високоефективний однореакторний метод синтезу аза- та діазаіндольного ядра в мультиграмових кількостях який передбачає послідовне використання реакції крос-сполучення Соногашири відповідних орто-галогенанілінів із ТМС-ацетиленом та подальшою гетероциклізацією за Лароком. Було отримано більше 15 сполук азаіндольного ряду з виходами 53-85%, та діазинові похідні: 3-хлоро-7Н-піроло[2,3-с]-піридазин, 3-хлоро-5Н-піроло[3,2-с]піридазин, 5Н-піроло[2,3-б]піразин, 2-метил-7Н-піроло[2,3-д]піримідин. Продемонстровано толерантність підходу до низки функціональних груп, показано відмінності в отриманні 4- та 7-азаіндолів на

стадії циклізації Ларока, показано, що синтез 6-фторо-1-метил-піроло[2,3-*b*]піридину за тих самих умов не дає бажаного продукту та потребує розробки додаткового дослідження. Проведено детальне дослідження оптимального методу отримання 6-фторо-1H-піроло[2,3-*b*]піридину, та проведено його масштабування в мультиграмових кількостях. Виявлено закономірності впливу положення азоту та замісників у піридиновому циклі на можливість проходження гетероциклізації. Відпрацьовано методи введення різноманітних функціональних груп у 3-тє положення азаїндольного ядра з метою отримання перспективних будівельних блоків для потреб медичної хімії та функціональних матеріалів. Також, було отримано раніше невідомі представники аза-триптамінів. Досліджено закономірності впливу положення замісників у піридиновому циклі на перебіг реакції електрофільного заміщення, та отримано раніше невідомі похідні альдегідів та карбонових кислот. Показано, що 3,6-дихлор1,2,4,5-тетразин є зручною вихідною сполукою для конструювання раніше не описаних похідних хлорпіридазину, анельованих 5-10 -ланковими окса- та аза-насиченими циклами. Встановлено, що зі збільшенням розміру циклу умови реакції стають більш жорсткішими, а виходи суттєво знижуються. Розроблено нову просту стратегію синтезу для 5- та 6-ланкових циклів. Показано можливість подальшого використання отриманих похідних у реакціях карбонілювання та відновлення.

2. This dissertation is devoted to the development of preparative and efficient methods for the synthesis of 4-, 5-, 6- and 7-azaindoles functionalized with various donor and acceptor groups, 3-chloro-7H-pyrrolo[2,3-*c*]pyridazine, 3-chloro-5H-pyrrolo[3,2-*c*]pyridazine and 3-chloro-6,7-dihydro-5H-pyrrolo[2,3-*c*]pyridazine, investigation of their chemical properties. As result of the work, a highly efficient method for the synthesis of the aza- and diazaindole core in multigram quantities was found, using the Sonogashira coupling reaction of the corresponding ortho-haloanilines with TMS-acetylene followed by heterocyclization according to the Larock method. This approach afforded 15 azaindole derivatives in 53-85% yields, including 3-chloro-7H-pyrrolo[2,3-*c*]pyridazine, 3-chloro-5H-pyrrolo[3,2-*c*]pyridazine, 5H-pyrrolo[2,3-*b*]pyrazine and 2-methyl-7H-pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidine. The developed approach demonstrated good tolerance toward various function groups, differences in the preparation of 4- and 7-azaindoles were also showed. The synthesis of 6-fluoro-1H-pyrrolo[2,3-*b*]pyridine was thoroughly investigated, optimizing the conditions for its multi-gram scale production. Synthesis of 6-fluoro-1-methyl-pyrrolo[2,3-*b*]pyridine under the same conditions fails to afford the desired product. A simple two-stage preparative method for obtaining 4-, 5-, 6- and 7-azaindoles and pyrrolopyridazine derivatives, the majority of which were not previously reported in literature, has been developed. Regularities governing the effect of the nitrogen position and substituents on the pyridine ring on the possibility of heterocyclization have been established. It was found that the 3-position of the azaindole core can be used for structural modification to obtain promising precursors for the construction of novel heterocyclic systems. Previously unknown representatives of aza-tryptamines were synthesized. Regularities governing the effect of substituent positions in the pyridine ring on the possibility of preparing aldehydes and carboxylic acids have been established. It was shown that 3,6-dichloro-1,2,4,5-tetrazine is a convenient starting compound for the construction of previously undescribed chloropyridazine derivatives annulated with 5- to 10- membered oxa- and aza-saturated rings. It was found that with an increase in the ring size, the reaction conditions become harsher, and the yields decrease. A novel, simple synthetic strategy has been developed for 5- and 6-membered rings. The possibility of subsequent of the prepared derivatives in carbonylation and reduction reactions has been shown.

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: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- Kordubailo M. V., Borysov O.V., Vlasov S.V., Voloshchuk V.V., Ryabukhin S.V., Volochnyuk D.M. Practical Toolkit for the Installation of Pyrrolo[2,3-c/3,2-c]pyridazine Cores into MedChem Relevant Compounds. Journal of the Organic Chemistry 2026, 91 (27), p. 9290–9301. <https://doi.org/10.1021/acs.joc.6c00322>
- Kordubailo M.V., Tolmachev A.A. Optimization and Scaling up of the Azaindole Derivatives Synthesis. Journal of Organic and Pharmaceutical Chemistry. 2025. 23 (3). p. 4–10. <https://doi.org/10.24959/ophcj.25.323307>
- Kordubailo M.V., Borysov O.V., Vlasov S.V., Ryabukhin S.V., Volochnyuk D.M. Design and synthesis for purine analogs with different annelated azines. ACS Fall 2023, August 13–17, 2023, San Francisco, California, USA.
- Kordubailo M.V., Borysov O.V., Vlasov S.V., Ryabukhin S.V., Volochnyuk D.M. The assembly of fused pyridazines via one-pot sequence IEDDA reaction, scope and limitations. ACS Spring 2025, March 23–27, 2025, San Diego, California, USA.
- Kordubailo M.V., Borysov O.V., Zotkin A.D. Synthesis and functionalization of Azaindole analogues. XIX Наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2023», м. Львів, 29–31 травня 2023 р.
- Kordubailo M.V., Borysov O.V., Volochnyuk D.M. Synthesis and functionalization of fluoro substituted pyrrolopyridines. XXVI Українська конференція з органічної та біоорганічної хімії, м. Ужгород, 16–20 вересня 2024 р. Ужгород: УжНУ, 2024. С. С–56.
- Кордубайло М.В., Борисов О.В., Рябухін С.В., Волочнюк Д.М. Дизайн та синтез аналогів пурину з різними анельованими азинами. XXVI Українська конференція з органічної та біоорганічної хімії, м. Ужгород, 16–20 вересня 2024 р. Ужгород: УжНУ, 2024. С. С–66.
- Кордубайло М.В., Борисов О.В., Зоткін О.О. Дослідження реакційної здатності 4- та 7-азаіндолів. XV Всеукраїнській конференції молодих вчених, студентів та аспірантів з актуальних проблем хімії, м. Харків, 2025, 7–10 жовтня 2025 р.

Наукова (науково-технічна) продукція: методи, теорії, гіпотези

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: 0119U102718

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Борисов Олександр Володимирович
2. Oleksandr V. Borysov

Кваліфікація: к. х. н., с.д., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0360-9295

Додаткова інформація:

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

Код за ЄДРПОУ: 05417325

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сливка Наталія Юріївна

2. Nataliia Y. Slyvka

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3811-7138

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шабликін Олег Валентинович

2. Shablykin Oleh V.

Кваліфікація: к. х. н., с.д., 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, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Безгубенко Людмила Валеріївна

2. Ludmyla V. Bezgubenko

Кваліфікація: к. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.08

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0002-3308-504X

Додаткова інформація:

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

Код за ЄДРПОУ: 05417325

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Назаренко Константин Геннадійович

2. Konstantin H. Nazarenko

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.08

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-1037-6381

Додаткова інформація:

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

Код за ЄДРПОУ: 05417325

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

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

Кулініч Андрій Володимирович

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

Кулініч Андрій Володимирович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Курдюкова Ірина Володимирівна

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна