

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U001377

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-04-2025

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Агунович Володимир Андрійович

2. Volodymyr A. Ahunovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

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: ОП 20766 Біоорганічна хімія; нафтохімія і вуглехімія / освітньо-наукова програма (102 Хімія)

Дата захисту: 24-06-2025

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: 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:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 8661

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:

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

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:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.23.

Тема дисертації:

1. Розробка нових підходів до синтезу 1-трифлуорометил-1-арил/гетарил-дизаміщених циклопропанів і циклобутанів та дослідження їх властивостей
2. Development of new approaches to the synthesis of 1-trifluoromethyl-1-aryl/heteroaryl-disubstituted cyclopropanes and cyclobutanes and the study of their properties

Реферат:

1. 1-трифлуорометил-1-арил/гетарил-дизаміщені циклопропани та циклобутани. Розробка ефективних масштабованих методів синтезу зазначених сполук, вивчення їхніх фізико-хімічних і біологічних властивостей, а також оцінка потенціалу таких фрагментів як структурних аналогів трет-бутильної групи у біологічно активних молекулах. Органічний синтез; інструментальні методи визначення структури та індивідуальності синтезованих сполук (ЯМР-спектроскопія на ядрах ^1H , ^{13}C та ^{19}F , мас-спектрометрія (MS), HRMS, елементний аналіз, рентгеноструктурний аналіз); дослідження біологічних властивостей. Вперше систематично досліджено реакцію деоксофлуорування циклопропанкарбонових та циклобутанкарбонових кислот та розроблено препаративний метод мультиграмового синтезу нових речовин із CF_3 -

циклопропановим та CF₃-циклобутановим фрагментом. Продемонстровано здатність солей лужних металів карбонових кислот теж вступати в реакцію деоксофлуорування. Систематично досліджено можливі шляхи модифікації синтезованих речовин. Продемонстровано, що 1-CF₃-1-дизаміщені циклопропани та циклобутани можуть бути перспективними замісниками у складі біоактивних сполук як біоізостери трет-бутильної групи. Сфера використання – органічна та біоорганічна хімія.

2. 1-Trifluoromethyl-1-aryl/heteroaryl-disubstituted cyclopropanes and cyclobutanes. Development of efficient and scalable synthetic methods for these compounds, investigation of their physico-chemical and biological properties, and evaluation of their potential as structural analogs of the tert-butyl group in biologically active molecules. Organic synthesis; instrumental techniques for structural elucidation and purity confirmation of synthesized compounds (¹H, ¹³C, and ¹⁹F NMR spectroscopy, mass spectrometry (MS), high-resolution mass spectrometry (HRMS), elemental analysis, X-ray crystallography); biological activity studies. For the first time, a systematic investigation of the deoxofluorination reaction of cyclopropanecarboxylic and cyclobutanecarboxylic acids has been conducted, and a preparative method for multigram-scale synthesis of new compounds containing CF₃-cyclopropane and CF₃-cyclobutane fragments has been developed. The ability of alkali metal salts of carboxylic acids to also undergo deoxofluorination reactions has been demonstrated. Possible modification pathways of the synthesized compounds have been explored. It has been shown that 1-CF₃-1-disubstituted cyclopropanes and cyclobutanes are promising structural motifs in bioactive compounds as bioisosteres of the tert-butyl group. Field of application: Organic and bioorganic chemistry

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: Освоєння нових технологій транспортування енергії, впровадження енергоефективних, ресурсозберігаючих технологій, освоєння альтернативних джерел енергії

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- Ahunovych V., Klipkov A.A., Bugera M., Tarasenko K., Trofymchuk S., Stanko O., Boretskyi A., Zheludenko M., Sadkova I.V., Mykhailiuk P.K. General and Scalable Approach to Trifluoromethyl-Substituted Cyclopropanes. *The Journal of Organic Chemistry* 2023, 88 (6), 3859–3870
- Ahunovych V., Klipkov A.A., Bugera M., Tarasenko K., Trofymchuk S., Razhyk B., Boretskyi A., Stanko O., Panasiuk Y., Shablykin O., Al-Maali G., Lesyk D., Klymenko-Uliyanov O., Horbatok K., Bodenchuk I., Kosach V., Borysko P., Kubyshkin V., Mykhailiuk P.K. CF₃-Cyclobutanes: Synthesis, Properties, and Evaluation as a Unique tert-Butyl Group Analogue. *JACS Au* 2024, 4 (11), 4507–4517

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0119U100611, 0122U000443

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

- Герус Ігор Іванович
- Igor Gerus

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-5086-9466

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:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

- Тимошенко Вадим Михайлович
- Vadim M. Timoshenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4879-604X

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:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

- Мілохов Демид Сергійович
- Demyd S. Milokhov

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:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Головченко Олександр Володимирович

2. Oleksandr V. Holovchenko

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, буд. 1, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Фрасинюк Михайло Сергійович

2. Mykhaylo S. Frasyuniuk

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3133-601X

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:

VIII. Заключні відомості

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

Смолій Олег Борисович

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

Смолій Олег Борисович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Шутко М.М

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна