Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U000016

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-01-2025

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шавріна Оксана Миколаївна
2. Oksana M. Shavrina

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0001-2751-1922

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: 30-03-2023

Спеціальність за освітою: Хімічні технології органічних речовин

Місце роботи здобувача: 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:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): 47679

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:

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, буд. 5, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.21.21.27, 31.21.21.07, 31.21.27.07

Тема дисертації:

1. Похідні піридиніл- та піримідинілдифторооцтових кислот.
2. Pyridinyl- and pyrimidinyldifluoroacetic acids derivatives.

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці зручних методів фторування метиленової ланки похідних піридиніл- та піримідинілоцтових кислот, а також їх фосфорних аналогів, піридинілметилфосфонових кислот; дослідженню синтетичного потенціалу одержаних сполук в дизайні біологічно перспективних молекул, які поєднують в одній структурі гетероциклічне ядро (піридин, піримідин, піперидин), дифторометильну групу та здатну до модифікації амінну, спиртову, кислотну, імінну та інші функції. Досліджено процес електрофільного фторування N-фторобензолсульфон-імідом похідних піридиніл-, піримідинілоцтових кислот та їх фосфорних аналогів в присутності основи. Встановлено закономірності впливу природи основи на перебіг електрофільного фторування і розроблено дві загальних процедури, які включають використання сильних металоорганічних основ, силіламіду літію та трет-бутил літію, або м'якої неорганічної основи – карбонату літію, що дозволяють одержувати фторовані похідні з високими виходами, в

тому числі селективно реалізовувати моно- та гем-дифторування. Встановлено закономірності впливу природи основи на перебіг електрофільного фторування дією N-фторобензолсульфоніміду в присутності карбонату літію та запропоновано його механізм. Досліджено реакційну здатність ізомерних піридиніл-, піримідинілацетатів та відповідних нітрилів в моно- та гем-дифторуванні дією N-фторобензолсульфоніміду. Продемонстровано синтетичний потенціал фторованих похідних піридиніл-, піримідинілоцтових та піридинілметилфосфонових кислот, досліджено особливості їх відновлення різними типами відновлювальних систем (H2 на Ni/Ra, Rh/C; BH3 /SMe2 ; LiAlH4 ; NaBH4), взаємодії з O-, P-, N-, S-центрованими нуклеофілами та особливості хімічної поведінки отриманих будівельних блоків в реакціях циклоконденсації.

2. The dissertation is devoted to the development of convenient fluorination methods of the methylene link of pyridinyl- and pyrimidinylacetic acids derivatives, and their phosphorus analogues, pyridinylmethylphosphonic acids; investigation of the obtained compounds synthetic potential in the design of biologically promising molecules combining heterocyclic core (pyridine, pyrimidine, piperidine), difluoromethyl group and modifiable amine, alcohol, acid, imine and other functions in one structure. The process of electrophilic fluorination of pyridinyl-, pyrimidinylacetic acid derivatives and their phosphorus analogues with N-fluorobenzenesulfonimide in the presence of a base was investigated. The influence of the base's nature on electrophilic fluorination has been established and two general fluorination procedures have been developed. The procedures include the use of strong organometallic bases, lithium silylamide and tert-butyl lithium, or weak inorganic base – lithium carbonate, which allow obtaining fluorinated derivatives with high yields, including selective mono- and gem-difluorination. The influence of the base's nature on electrophilic fluorination with N-fluorobenzenesulfonimide in the presence of lithium carbonate was established and its mechanism was proposed. The reactivity of isomeric pyridinyl-, pyrimidinylacetatesand corresponding nitriles in mono- and gem-difluorination under the action of N-fluorobenzenesulfonimide was studied. The synthetic potential of fluorinated pyridinyl, pyrimidinylacetic, and pyridinylmethylphosphonic acids derivatives was demonstrated, their reduction by various types of reducing systems (H2 on Ni/Ra, Rh/C; BH3 /SMe2 ; LiAlH4 ; NaBH4), interactions with O-, P-, N -, S-centered nucleophiles and the chemical behavior of the obtained building blocks in cyclocondensation reactions were investigated.

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:

- Shavrina, O.; Bezdudny, A.; Rassukana, Y. Synthesis and some transformations of all three isomers of □,□-difluoropyridinylacetonitrile. Journal of Fluorine Chemistry 2021, 246, 109792.
- Shavrina, O.; Bezgubenko, L.; Bezdudny, A.; Onys'ko, P.; Rassukana, Y. □-(Imino)pyridyldifluoroethyl phosphonates: novel promising building blocks in synthesis of biorelevant aminophosphonic acids derivatives. Organics 2021, 2, 72-83.
- Shavrina, O.; Onys'ko, P.; Rassukana, Y. Mono- and difluorination of methylene group in isomeric pyrimidinyl- and pyridinylacetates with N-fluorobenzenesulfonimide. Journal of Fluorine Chemistry 2022, 261-262, 110027.

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

Соціально-економічна спрямованість: розроблено та оптимізовано препаративні методи гетеробензильного фторування похідних піридиніл-, піримідинілоцтових кислот та їх фосфорних аналогів,

показано зручність їх масштабування. запропонований підхід гетеробензильного фторування може бути розширений на інші азини. одержано ряд ізомерних фторованих піридиніл-, піримідинілацетатів, відповідних нітрилів та фосфонатів. показано зручність їх застосування як попередників синтетично цінних спиртів, кислот, амінів, імінофосфонатів, які в свою чергу можуть бути використані для конструювання більш складних гетероциклічних систем – піримідонів та оксадіазолів, тіазолідонів та тіазинонів. запропоновано зручний метод синтезу дифторопіридинілетиламіну, що є одним із попередників інгібіторів тромбіну.

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: 017U003841

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рассукана Юлія Вікторівна
2. Yuliia V. Rassukana

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3101-9911

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:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гордієнко Ольга Василівна
2. Olga Hordiyenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4749-7195

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Броварець Володимир Сергійович
2. Volodymyr S. Brovarets

Кваліфікація: д.х.н., професор, чл-кор.НАН України, 02.00.03, 02.00.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-6668-3412

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:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ягупольський Юрій Львович
2. Yurii L. Yahupolskyi

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-5179-4096

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:

1. Михайличенко Сергій Сергійович

2. Serhii S. Mykhailychenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-2922-7933

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:

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	Васільєва Тетяна Анатоліївна
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна