

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U004008

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-07-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Багреева Оксана Сергіївна

2. Oksana S. Bahrieieva

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: 15-09-2026

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, 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 16663

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:

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, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.23.99

Тема дисертації:

1. Синтез 4-фосфоровмісних похідних 1,3-оксазолу та 1,3-тіазолу як потенційних протипухлинних агентів
2. Synthesis of 4-phosphorus-containing derivatives of 1,3-oxazole and 1,3-thiazole as potential anticancer agents

Реферат/анотація:

1. Фосфорильовані похідні 1,3-азолів, їх синтез, фізико-хімічні властивості, протипухлинна та антибактеріальна активність. Метою дослідження було одержання нових фосфорильованих похідних 1,3-азолів, встановлення взаємозв'язку між їхньою будовою, електронними характеристиками та біологічною активністю, а також оцінка перспективності синтезованих сполук як потенційних протипухлинних і антибактеріальних агентів. У роботі використано методи органічного синтезу, очищення та встановлення будови синтезованих сполук за допомогою ІЧ-спектроскопії, ¹H, ¹³C, ³¹P ЯМР-спектроскопії, мас-спектрометрії та елементного аналізу. Протипухлинну активність оцінювали in vitro на панелі пухлинних клітин NCI-60 та окремих клітинних лініях із визначенням показників GI50, TGI, LC50 та IC50. Антибактеріальну активність досліджували методом серійних розведень із визначенням мінімальної інгібуючої та бактерицидної концентрацій. Для прогнозування можливих механізмів дії, фармакокінетичних

характеристик і встановлення залежностей «структура–активність» застосовували молекулярний докінг, квантово-хімічні розрахунки, QSAR- та ADMET-моделювання. Синтезовано серію фосфорильованих похідних 1,3-оксазолу та 1,3-тіазолу з різними замісниками у положеннях C(2), C(4) та C(5). Встановлено вплив природи азольного циклу, фосфорильованого фрагмента та сірковмісних замісників на рівень біологічної активності. Показано, що окремі фосфонієві солі та фосфонатні похідні проявляють виражену протипухлинну активність, зокрема щодо клітинних ліній меланому, раку молочної залози та лейкемії. Деякі фосфонієві солі продемонстрували поєднання протипухлинної та антибактеріальної дії, зокрема щодо клінічних ізолятів *Acinetobacter baumannii*. Наукова новизна роботи полягає у цілеспрямованому синтезі нових фосфорильованих похідних 1,3-азолів та встановленні закономірностей зв'язку між їхньою структурою і біологічною активністю. Визначено роль ступеня окиснення сірковмісних замісників, електронних характеристик молекул і природи фосфоровмісного фрагмента у формуванні протипухлинного та антибактеріального ефекту. Отримані експериментальні та *in silico* дані створюють підґрунтя для подальшого раціонального дизайну біологічно активних фосфорильованих гетероциклів. Результати дослідження опубліковано у наукових виданнях і представлено на міжнародних та всеукраїнських наукових конференціях. Вони можуть бути використані у подальших дослідженнях, спрямованих на створення нових потенційних протипухлинних і антибактеріальних агентів, а також в освітньому процесі при викладанні органічної, медичної та біоорганічної хімії. Сфера використання біоорганічна хімія, органічна хімія та медична хімія.

2. Phosphorylated derivatives of 1,3-azoles, their synthesis, physicochemical properties, antitumor and antibacterial activity. The aim of the study was to obtain new phosphorylated 1,3-azole derivatives, establish relationships between their structure, electronic characteristics and biological activity, and assess their potential as promising antitumor and antibacterial agents. The research involved methods of organic synthesis, purification and structural characterization of the obtained compounds using IR spectroscopy, ¹H, ¹³C and ³¹P NMR spectroscopy, mass spectrometry and elemental analysis. Antitumor activity was evaluated *in vitro* using the NCI-60 cancer cell line panel and selected tumor cell lines with determination of GI₅₀, TGI, LC₅₀ and IC₅₀ values. Antibacterial activity was studied by serial dilution methods with determination of minimum inhibitory and bactericidal concentrations. Molecular docking, quantum-chemical calculations, QSAR and ADMET modelling were used to predict possible mechanisms of action, pharmacokinetic parameters and structure–activity relationships. A series of phosphorylated 1,3-oxazole and 1,3-thiazole derivatives bearing different substituents at the C(2), C(4) and C(5) positions was synthesized. The influence of the nature of the azole ring, phosphorylated fragment and sulfur-containing substituents on biological activity was established. It was shown that selected phosphonium salts and phosphonate derivatives exhibit pronounced antitumor activity, including activity against melanoma, breast cancer and leukemia cell lines. Some phosphonium salts demonstrated combined antitumor and antibacterial properties, in particular against clinical isolates of *Acinetobacter baumannii*. The scientific novelty of the study lies in the targeted synthesis of new phosphorylated 1,3-azole derivatives and the establishment of structure–activity relationships for these series. The role of sulfur oxidation state, electronic characteristics and the nature of the phosphorus-containing fragment in the manifestation of biological activity was determined. The obtained experimental and *in silico* data provide a basis for further rational design of biologically active phosphorylated heterocycles. The results have been published in scientific journals and presented at international and national conferences. They may be used in further research aimed at the development of new potential antitumor and antibacterial agents, as well as in teaching organic, medicinal and bioorganic chemistry. Field of application: bioorganic chemistry, organic chemistry and medicinal 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:

- Bahrieieva O.S., Kachaeva M.V., Kobzar O.L., Shulga Y.V., Golovchenko O.V., Golovchenko O.I., Nizhenkovska I.V., Mykhailenko O.V., Pilyo S.G., Zhirnov V.V., Brovarets V.S. Synthesis, Anticancer Screening, and Virtual Analysis of 5- S -Substituted Derivatives of 1,3 -Oxazol-4-ylphosphonates and 1,3-Oxazole-4-carbonitriles. SynOpen. 2025. Vol. 9, № 4. P. 268–281. DOI: <https://doi.org/10.1055/a-2741-9575>
- Hodyna D., Bahrieieva O., Shulga Yu., Kovalishyn V., Golovchenko O., Golovchenko O., Kachaeva M., Pilyo S., Trokhimenko O., Metelytsia L. In Silico And In Vitro Studies Of 1,3-Oxazol-4-ylphosphonium Salts As Dual-Functional Antibacterial And Anticancer Agents. ChemistrySelect. 2025. Vol. 10, № 20. e00282. DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.202500282>
- Semenyuta I., Golovchenko O., Bahrieieva O., Vydzhak R., Zhirnov V., Brovarets V. Synthesis, Characterization, In Vitro Anticancer Evaluation, ADMET Properties, and Molecular Docking of Novel 5-Sulfanyl Substituted (Thiazol-4-yl) Phosphonium Salts. ChemMedChem. 2024. Vol. 19, № 18. e202400205. DOI: <https://doi.org/10.1002/cmdc.202400205>
- Bahrieieva O.S., Golovchenko O.V., Golovchenko O.I., Zhirnov V.V., Brovarets V.S. New phosphorylated 5-(hydroxyalkylamino)-1,3-oxazoles as potential anticancer agents. Ukr. Bioorg. Acta. 2023. Vol. 18, № 1. P. 1814–9758. DOI: <https://doi.org/10.15407/bioorganica2023.01.032>

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0122U000439, 0120U100309, 0125U000347

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Головченко Олександр Володимирович

2. Oleksandr V. Holovchenko

Кваліфікація: д.х.н., с.д., 02.00.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7756-6019

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:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Онисько Петро Петрович

2. Petro P. Onysko

Кваліфікація: д.х.н., професор, 02.00.03, 02.00.08

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-6137-2778

Додаткова інформація: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004205548>

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. Пивоваренко Василь Георгійович

2. Vasyl H. Pyvovarenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-6652-2333

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Герус Ігор Іванович

2. Igor I. Gerus

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

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, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Демидчук Богдан Андрійович

2. Bohdan A. Demydchuk

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9125-3796

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:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради

Колодяжна Анастасія Олегівна

Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні

Колодяжна Анастасія Олегівна

Відповідальний за підготовку
облікових документів

Шутко М.М

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна