

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U002982

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. Фролов Андрій Іванович

2. Andrii I. Frolov

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: 03-09-2024

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): 6645

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: 31.21.21.15

Тема дисертації:

1. Селективне введення алкільного замісника в ρ -положення до карбонільної групи.
2. Selective introduction of an alkyl substituent into ρ -position of carbonyl compounds.

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці методів ρ -алкілювання карбонільних сполук. Основним синтетичним результатом стало одержання енамініонів у кількостях 100200 г, та їх подальша модифікація шляхом взаємодії з металоорганічними реагентами та/або каталітичного відновлення. Таким чином було розроблено коротку, просту у виконанні, відносно безпечну і дешеву та легко масштабовану послідовність стадій для введення метильної, первинних алкільних та вторинних замісників в ρ -положення різноманітних карбонільних сполук. Базуючись на одержаних даних щодо реакційності модельних субстратів, а також вже описаних у літературі методах синтезу та модифікації енамініонів, було підібрано оптимальні умови

проведення кожної стадії. Після етапу оптимізації, визначені умови було застосовано до репрезентативної множини субстратів, переважно неароматичних ендочіклических кетонів, вивченню яких присвячено Розділ 2 та Розділ 3. Таким чином було досліджено межі успішного застосування методу і коло «проблемних» субстратів, для яких послідовність не працює або працює недостатньо ефективно. Як позитивні, так і негативні результати було пояснено. У разі можливості утворення стереоізомерів, будову одержаних продуктів було підтверджено методами рентгеноструктурного аналізу та двовимірної ЯМР-спектроскопії.

2. The thesis is devoted to elaboration of α -alkylation methods of carbonyl compounds. Major synthetic results include synthesis of enaminones at amounts of 100200 g with their following modification via interaction with organometallic reagents and/or catalytic hydrogenation. A scalable, concise, relatively simple, safe and economically reasonable synthetic sequence for introduction of methyl, primary alkyl and secondary alkyl groups into position of diverse carbonyl compounds. Optimal conditions for each step were designed after analysis of model experiment results as well as existing literature methods of enaminone synthesis and modification. After the optimization stage, the chosen conditions were applied to the representative array of substrates, mainly non-aromatic endocyclic ketones that are investigated in Part 2 and Part 3. Scope and limitations of the method were explored. Both positive and negative results were explained. In case of unclear stereochemistry, configuration of the products was determined by either Xrays diffraction or 2D ЯМР experiments.

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) Frolov, A. I., Ostapchuk, E. N., Pashenko, A. E., Chuchvera, Ya. O., Rusanov, E. B., Volochnyuk, D. M., & Ryabukhin, S. V. (2021). Selective α Methylation of Ketones. *The Journal of Organic Chemistry*, 86 (11), 7333–7346.
- 2) Frolov, A. I., Chuchvera, Ya. O., Ostapchuk, E. N., Druzhenko, T. V., Volochnyuk, D. M., & Ryabukhin, S. V. (2024). Toward a Chemical Constructor: A LegoLike Approach for Formal α Alkylation of Cyclic Ketones. *The Journal of Organic Chemistry*, 89 (11), 8208–8219.
- Frolov, A. I., Lebid, D. S., Ostapchuk, E. N., Druzhenko, T. V., Volochnyuk, D. M., & Ryabukhin, S. V. (2024). Perspectives of Alkyl Introduction into Methylenecontained Heterocycles. *ChemRxiv*, in press.

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. Рассукана Юлія Вікторівна

2. Yuliia V. Rassukana

Кваліфікація: д. х. н., професор, 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шабликін Олег Валентинович

2. Oleh V. Shablykin

Кваліфікація: к. х. 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

Рецензенти**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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Грабчук Галина Петрівна

2. Halyna P. Hrabchuk

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.06

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