

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U003646

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-09-2025

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Малащук Андрій Сергійович

2. Andrii S. Malashchuk

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: Хімія

Дата захисту: 12-09-2025

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 організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 10642

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

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:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Університетський

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.21.17, 31.21.23

Тема дисертації:

1. Функціоналізовані спіро[2.3]гексани, спіро[3.3]гептани та їх монофлуоровані аналоги.
2. Functionalized spiro[2.3]hexanes, spiro[3.3]heptanes and their monofluorinated analogs.

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена синтезу, фізико-хімічним властивостям та потенційним застосуванням нових циклічних α -амінокислот, діамінів і флуорованих сполук на основі спіроциклічних каркасів, а саме спіро[2.3]гексану та спіро[3.3]гептану. Основна увага зосереджена на розробці ефективних синтетичних підходів до отримання цих структурно унікальних молекул, вивченні їхніх кислотно-основних характеристик, ліпофільності, водорозчинності та ізостерних властивостей. Досліджено синтез і фізико-хімічні властивості нових α -амінокислот на основі спіро[2.3]гексану та спіро[3.3]гептану. Використання циклічних амінокислот привертає дедалі більшу увагу через їхню здатність підвищувати селективність і

біологічну активність лікарських сполук. Зокрема, похідні циклоalkanів демонструють покращені фізико-хімічні характеристики завдяки підвищеній жорсткості структури, що дозволяє ефективніше фіксувати просторове розташування функціональних груп. Синтез амінокислот здійснено двома основними методами: модифікацією відповідних дієстерів через перегрупування Курціуса та класичним методом Бюрхера–Бергса з утворенням гідантоїнів. Обидва підходи дозволили отримати цільові сполуки з високими виходами (до 92%) та можливістю масштабування до 22.5 г. Визначено кислотно-основні характеристики нових амінокислот, зокрема ізоелектричні точки (pI), які виявилися близькими до значень природних амінокислот, таких як валін і метіонін. Дослідження показало, що введення спіроциклічного фрагмента спричиняє зниження pI в середньому на 0.2 одиниці порівняно з моноциклічними аналогами, що головним чином пояснюється змінами кислотності протонованої аміногрупи.

2. The dissertation work is devoted to the synthesis, physicochemical properties, and potential applications of novel cyclic α -amino acids, diamines, and fluorinated compounds based on spirocyclic frameworks, specifically spiro[2.3]hexane and spiro[3.3]heptane. The primary focus is on the development of efficient synthetic approaches for obtaining these structurally unique molecules, as well as on the study of their acid-base characteristics, lipophilicity, water solubility, and isosteric properties. The synthesis and physicochemical properties of novel α -amino acids based on spiro[2.3]hexane and spiro[3.3]heptane were studied. The use of cyclic amino acids is attracting increasing attention due to their ability to enhance the selectivity and biological activity of pharmaceutical compounds. In particular, cycloalkane derivatives exhibit improved physicochemical characteristics due to their increased structural rigidity, which allows for more effective spatial fixation of functional groups. The target amino acids were synthesized using two main methods: modification of the corresponding diesters via the Curtius rearrangement and the classical Bücher–Bergs method involving hydantoin formation. Both approaches enabled the production of target compounds with high yields (up to 92%) and scalability up to 22.5 g. The acid-base characteristics of the novel amino acids were determined, including their isoelectric points (pI), which were close to those of natural amino acids, i.e. valine and methionine. The study revealed that the introduction of a spirocyclic fragment resulted in an average pI decrease of 0.2 units compared to monocyclic analogs, primarily due to changes in the acidity of the protonated amino group.

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. Malashchuk, A.; Chernykh, A. V.; Liashuk, O. S.; Hurbanov, R.; Lomaka, M.; Tkachuk, H.; Granat, D.; Grygorenko, O. O. Spiro[2.3]Hexane and Spiro[3.3]Heptane-derived α -Amino Acids: Synthesis and Isoelectric Point Evaluation. *ChemistrySelect* 2024, 9 (31).
- 2. Malashchuk, A.; Demchuk, O. P.; Razhyk, B. V.; Holubievskyi, V. O.; Kudryk, O. V.; Chernykh, A. V.; Hryshchuk, O. V.; Sosunovych, B. S.; Volochnyuk, D. M.; Vashchenko, B. V.; Grygorenko, O. O. 2 α and 3 α -Fluorocyclobutane Building Blocks for Organic and Medicinal Chemistry. *Eur. J. Org. Chem.* 2024, 27 (32).
- 3. Malashchuk, A.; Chernykh, A. V.; Dobrydnev, A. V.; Grygorenko, O. O. Fluorine-labelled Spiro[3.3]Heptane-derived Building Blocks: Is Single Fluorine the Best? *Eur. J. Org. Chem.* 2021, 2021 (35), 4897–4910.
- 4. Malashchuk, A.; Chernykh, A. V.; Perebyinis, M. Y.; Komarov, I. V.; Grygorenko, O. O. Monoprotected Diamines Derived from 1,5 α -Disubstituted (Aza)Spiro[2.3]Hexane Scaffolds. *Eur. J. Org. Chem.* 2021, 2021 (47),

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

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. Григоренко Олександр Олегович

2. Oleksandr O. Hryhorenko

Кваліфікація: д. х. н., професор, 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

Сектор науки: Університетський

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Данилюк Іванна Юріївна

2. Ivanna Y. Danyliuk

Кваліфікація: к. х. н., старший науковий співробітник, 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. Виджак Роман Миколайович

2. Roman M. Vydzhak

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

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. Мілохов Демид Сергійович

2. 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

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Горічко Мар'ян Віталійович
2. Mar'ian V. Horichko Mar'ian Vitaliiiovych

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

Сектор науки: Університетський

VIII. Заключні відомості

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

Воловенко Юліан Михайлович

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

Воловенко Юліан Михайлович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Воронцова Оксана Анатоліївна

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна