

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U004545

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-08-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Селіхова Анна Ігорівна

2. Anna I. Selikhova

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-6773-8796

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: 06-08-2026

Спеціальність за освітою: Хімічні технології та інженерія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 14691

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:

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, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 61.37.37, 61.59.33, 61.59.37

Тема дисертації:

1. Синтез, структура та властивості каліксарен-диметилфосфіноксидів і сульфамідофосфонових кислот.
2. Synthesis, structure and properties of calixarene dimethylphosphine oxides and sulfamidophosphonic acids.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці зручних препаративних методів функціоналізації верхнього вінця калікс[4]аренів та тіакалікс[4]аренів фрагментами диметилфосфіноксидів, п-гідроксиметилдиметилфосфіноксидів та сульфамідофосфонових кислот з метою надання отриманим сполукам корисних фізико-хімічних та біологічних властивостей. Взаємодією тетрахлорометил-тетрагідроксикалікс[4]арену та тетрахлорометил-тетрагідрокситіакалікс[4]арену з (триметилсиліл)диметилфосфінітом отримані водорозчинні тетрагідрокси(тіа)каліксарени, що містять чотири гідрофільні диметилфосфіноксидні угруповання на верхньому вінці макроциклу. Розроблені препаративні методи фосфорилювання алкокси-формілкаліксаренів (триметилсиліл)диметилфосфінітом, які ведуть до отримання каліксаренів функціоналізованих п-гідроксиметилдиметил-фосфіноксидними групами. Встановлено, що ступінь алкілювання нижнього вінця диформілкаліксаренів суттєво впливає на

стереохімічний результат реакції з (триметилсиліл)диметилфосфінітом. Так, фосфорилювання дипропоксидиформілкаліксарену проходить стереоспецифічно з утворенням виключно (RR + SS) рацемічної форми каліксарен-*p*-гідроксиметилдиметилфосфіноксиду. Водночас, при фосфорилюванні тетрапропоксидиформілкаліксарену утворюються еквімолярні суміші рацемічної та мезо-форми каліксарен-*p*-гідроксиметилдиметилфосфіноксиду. Методом рентгеноструктурного аналізу досліджена структура, стереохімія та здатність до формування $P=O \cdots H-O$ міжмолекулярних водневих зв'язків каліксарен-*p*-гідроксиметилдиметилфосфіноксидів. Встановлено, що дипропоксикаліксарен, який містить одну *p*-гідроксиметил-диметилфосфіноксидну групу, формує одновимірний лінійний полімерний ланцюг, з'єднаний водневими зв'язками $P=O \cdots H-O$. Натомість, дипропоксикаліксарен із двома *p*-гідроксиметилдиметилфосфіноксидними групами утворює стереорегулярний спіральний полімерний ланцюг з'єднаний десятичленними $P=O \cdots H-O$ водневозв'язаними циклами. Показано, що самоорганізація каліксарен-*p*-гідроксиметилдиметилфосфіноксидів залежить від конформаційної рухливості макроциклічного скелета та визначається ступенем заміщення нижнього вінця макроциклу. Взаємодією моно- та диформілкаліксаренів з надлишками сульфамідів в розчині тетраетоксисилану при температурі 190 °C з високими виходами отримані моно- та дисульфонілімінокаліксарени. Розроблені умови діастереоспецифічного приєднання діетилфосфіту до $C=N$ зв'язку моно- та дисульфонілімінокаліксаренів, яке веде до утворення мезо-форм етилових естерів каліксарен-сульфамідофосфонових кислот. Послідовною обробкою отриманих сполук бромотриметилсиланом та метанолом синтезовані каліксарен-сульфамідофосфонові кислоти. Встановлено, що амфіфільні діалкоксікаліксарен-біс-*p*-гідроксиметилдиметилфосфіноксиди у водних середовищах утворюють міцели та термореверсивні гелі, перспективні як системи доставки лікарських препаратів. Визначені методом ОФ ВЕРХ константи стійкості ($K_A = 1100 - 12000 \text{ M}^{-1}$) супрамолекулярних комплексів господар-гість водорозчинних каліксарен-фосфонових кислот та каліксарен-диметилфосфіноксидів з АФІ противірусних препаратів різних класів свідчать про перспективу їх застосування як векторів систем доставки. Знайдено, що каліксарен-сульфамідофосфонові кислоти селективно інгібують Na_p, K_p -АТРази плазматичної мембрани міоцитів матки ($IC_{50} 36-61 \text{ nM}$) і мають перспективу використання як регулятори кальцієвого гомеостазу та скоротливої активності міометрія.

2. The dissertation is devoted to the development of convenient preparative methods for the functionalization of the upper rim of calix[4]arenes and thiacalix[4]arenes with dimethylphosphine oxide, *p*-hydroxymethyl-dimethylphosphine oxide, and sulfamidophosphonic acid fragments, with the aim of imparting useful physicochemical and biological properties to the resulting compounds. The reaction of tetrachloromethyl-tetrahydroxycalix[4]arene and tetrachloromethyl-tetrahydroxythiacalix[4]arene with (trimethylsilyl)dimethyl phosphinite afforded water-soluble tetrahydroxy(thia)calixarenes bearing four hydrophilic dimethylphosphine oxide groups at the upper rim of the macrocycle. Preparative methods for the phosphorylation of alkoxy-formylcalixarenes with (trimethylsilyl)dimethyl phosphinite were developed, providing calixarenes functionalized with *p*-hydroxymethyldimethylphosphine oxide groups. It was established that the degree of alkylation of the lower rim of diformylcalixarenes significantly affects the stereochemical outcome of the reaction with (trimethylsilyl)dimethyl phosphinite. Thus, phosphorylation of dipropoxy-diformylcalixarene proceeds stereospecifically to afford exclusively the (RR + SS) racemic form of calixarene-*p*-hydroxymethyldimethylphosphine oxide. In contrast, phosphorylation of tetrapropoxy-diformylcalixarene yields equimolar mixtures of the racemic and meso forms of calixarene-*p*-hydroxymethyldimethylphosphine oxide. The structure, stereochemistry, and ability of calixarene-*p*-hydroxymethyldimethylphosphine oxides to form intermolecular $P=O \cdots H-O$ hydrogen bonds were investigated by X-ray crystallographic analysis. It was found that a dipropoxycalixarene containing one *p*-hydroxymethyldimethylphosphine oxide group forms a one-dimensional linear polymeric chain linked by $P=O \cdots H-O$ hydrogen bonds. In contrast, a dipropoxycalixarene bearing two *p*-hydroxymethyldimethylphosphine oxide groups forms a stereoregular helical polymeric chain connected through ten-membered $P=O \cdots H-O$ hydrogen-bonded rings. It was demonstrated that the self-assembly of calixarene-*p*-hydroxymethyldimethylphosphine oxides depends on the conformational mobility of the macrocyclic framework

and is governed by the degree of substitution at the lower rim of the macrocycle. The reaction of mono- and diformylcalixarenes with excess sulfonamides in tetraethoxysilane solution at 190 °C afforded mono- and disulfonylimino calixarenes in high yields. Conditions for the diastereospecific addition of diethyl phosphite to the C=N bond of mono- and disulfonylimino calixarenes were developed. This reaction leads to the formation of meso forms of the ethyl esters of calixarene-sulfamidophosphonic acids. Subsequent treatment of the obtained compounds with bromotrimethylsilane followed by methanol afforded calixarene-sulfamidophosphonic acids. It was established that amphiphilic dialkoxycalixarene-bis-*p*-hydroxymethyldimethylphosphine oxides form micelles and thermoreversible gels in aqueous media, making them promising candidates for drug delivery systems. The stability constants ($K_A = 1100\text{--}12000\text{ M}^{-1}$) of host-guest supramolecular complexes formed by water-soluble calixarene phosphonic acids and calixarene dimethylphosphine oxides with active pharmaceutical ingredients (APIs) of antiviral drugs from different classes, determined by RP-HPLC, indicate their potential application as vectors in drug delivery systems. It was found that calixarene-sulfamidophosphonic acids selectively inhibit Na^+, K^+ -ATPases of the plasma membrane of uterine myocytes ($\text{IC}_{50} = 36\text{--}61\text{ nM}$) and therefore represent promising candidates as regulators of calcium homeostasis and myometrial contractile activity.

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:

- S.O. Cherenok, S.V. Shishkina, A.I. Selikhova, A.B. Drapailo, V.I. Kalchenko. Synthesis and X-ray study of calix[4]arene-hydroxymethyldimethylphosphine oxides and their hydrogen-bonded self-assemblies. *Journal of Molecular Structure*. 2026, 1363, 145761. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2026.145761>
- O.I. Kalchenko, A.B. Drapailo, S.O. Cherenok, A.I. Selikhova, P. López-Cornejo, V.I. Kalchenko. Complexation of water soluble calix[4]arene-phosphine oxides with antiviral drugs. *Journal of Organic and Pharmaceutical Chemistry*. 2025, 23, 4, 12-21. <https://doi.org/10.24959/ophcj.25.342282>
- O.I. Kalchenko, S.O. Cherenok, A.I. Selikhova, P. López-Cornejo, A.B. Drapailo, V.I. Kalchenko. Study of the complexation of calix[4]arene-hydroxymethylphosphonic acid and calix[4]arene-hydroxymethyldimethylphosphine oxide with antiviral drugs. *Journal of Organic and Pharmaceutical Chemistry*. 2025, 23, 3, 11-21. <https://doi.org/10.24959/ophcj.25.336375>
- Olga I. Kalchenko, Alexander B. Rozhenko, Serhii O. Cherenok, Anna I. Selikhova, Andriy B. Drapailo, Pilar López-Cornejo, Vitaly I. Kalchenko. Stability constants and DFT calculations of anionic calixarene complexes with antiretroviral drugs Tenofovir and Emtricitabine. *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.* 2025, 105, 297-310. <https://doi.org/10.1007/s10847-024-01273-x>
- O.I. Kalchenko, A.B. Rozhenko, S.O. Cherenok, A.I. Selikhova, S.Yu. Suikov, A.A. Kyrylchuk, V.I. Kalchenko. Complexation of water-soluble phosphorylated calixarenes with uracils. Stability constants and DFT study of the supramolecular complexes. *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*. 2023, 103, 369-383. <https://doi.org/10.1007/s10847-023-01198-x>

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

Соціально-економічна спрямованість: системи доставки лікарських препаратів, регулятори кальцієвого гомеостазу та скоротливої активності міометрія

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: 0120U104649

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Черенок Сергій Олексійович

2. Serhii O. Cherenok

Кваліфікація: д. х. н., с.д., 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, 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. Смолій Олег Борисович

2. Oleg Smolii

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8346-4497

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. 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. Онисько Петро Петрович

2. Petro P. Onysko

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

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

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. Шандура Микола Петрович

2. Mykola P. Shandura

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0896-4376

Додаткова інформація:

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:

VIII. Заключні відомості

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

Костюк Олександр Миколайович

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

Костюк Олександр Миколайович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Курдюкова Ірина Володимирівна

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна