Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U101135

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-11-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Білецька Ірина Михайлівна
2. Iryna M. Biletska

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: 14-12-2023

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, буд. 1, 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): Наказ № 2616

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:

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, буд. 1, 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

Тема дисертації:

1. Синтез та властивості 2-(3,3,3-трифлуороацетоніл)хромонів
2. Synthesis and properties of 2-(3,3,3-trifluoroacetonyl)chromones

Реферат:

1. Вперше запропоновано зручний підхід для введення флуоровмісних фрагментів у молекули 2-алкілзаміщених похідних хромону шляхом їх взаємодії з трифлуороцтовим ангідридом у присутності CF3COOK. Розроблено методи синтезу 3-трифлуорометил-5-фенацилпіразолів, 3- трифлуорометил-5-фенацилізоксазолів та 3-трифлуорометилпіразол– дезоксибензоїнових гібридів, що відкриває можливість конструювання біологічно перспективних 3-трифлуорометильних похідних азолів. Розроблено умови проведення реакції Фішера за участю 3-трифлуо- рометил-5-фенацилпіразолів, 3-трифлуорометил-5-фенацилізоксазолів з похідними арилгідразинів, що є перспективним методом синтезу 3-(3-трифлуорометилпіразол-5-іл)індолів та 3-(3-трифлуорометилізоксазол-5-іл)- індолів. У результаті дослідження було синтезовано фокусовану бібліотеку на платформі 3-трифлуорометилпіразол–дезоксибензоїнових гібридів, 3- (трифлуорометил)-5-фенацилпіразолів, 3-

(трифлуорометил)-5-фенацил– ізоксазолів, а також 3-(3-трифлуорометилпіразол-5-іл)індолів, які представляють значний інтерес як потенційні інгібітори циклооксигенази (ЦОГ-2) завдяки подібності структури до відомих інгібіторів піразольної структури, а також потенційною протипухлинною активністю. Одержані результати розширюють уявлення про механізми та напрямки реакцій похідних хромону з бідентатними нуклеофілами.

2. A convenient approach for introducing fluorine-containing fragments into the molecules of 2-alkyl-substituted chromone derivatives is proposed for the first time by their interaction with trifluoroacetic anhydride in the presence of CF3COOK. Methods for the synthesis of 3-trifluoromethyl-5-phenacylpyrazoles, 3- trifluoromethyl-5-phenacylisoxazoles, and 3-trifluoromethylpyrazole-deoxybenzoin hybrids have been developed, opening up the possibility of constructing biologically promising 3-trifluoromethyl derivatives of azoles. Conditions for conducting the Fischer reaction involving 3-trifluoromethyl-5- phenacylpyrazoles and 3-trifluoromethyl-5-phenacylisoxazoles with derivatives of arylhydrazines have been established, which represents a promising method for the synthesis of 3-(3-trifluoromethylpyrazol-5-yl)indoles and 3-(3-trifluoro- methylisoxazol-5-yl)indoles. As a result of the investigation, a focused library on the platform of 3- trifluoromethylpyrazole-deoxybenzoin hybrids, 3-(trifluoromethyl)-5- phenacylpyrazoles, 3-(trifluoromethyl)-5-phenacylisoxazoles, as well as 3-(3- trifluoromethylpyrazol-5-yl)indoles was synthesized. These compounds are promising cyclooxygenase-2 (COX-2) inhibitors due to their structural similarity to known trifluoromethylpyrazole-based inhibitors, as well as plausible antiproliferative activity. The obtained results expand the understanding of the mechanisms and directions of the reaction of chromone derivatives with bidentate nucleophiles.

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:

- 1. Mrug, G. P.; Biletska, I. M.; Bondarenko, S. P.; Sviripa, V. M.; Frasinyuk, M. S. Trifluoroacetylation of 2-methyl- and 2-ethylchromones: a convenient access to 2-trifluoroacetonyl chromones. ChemistrySelect 2019, 4 (39), 11506-11510.
- 2. Biletska, I. M.; Mrug, G. P.; Bondarenko, S. P.; Kondratyuk, K. M.; Prostota, Y. O.; Sviripa, V. M.; Frasinyuk, M. S. Chemoselective synthesis of 3-trifluoromethylpyrazole-deoxybenzoin hybrids. J. Fluorine Chem. 2021, 242, 109698.
- 3. Biletska, I. M.; Mrug, G. P.; Prostota, Ya. O.; Kondratyuk, K. M.; Bondarenko, S. P.; Frasinyuk, M. S. Synthesis of 2-trifluoroacetonyl-3-alkyl/alkoxy- chromones and their reactions with 1,2-bidentate nucleophiles. Heterocycles. 2022, 104 (7), 1229-1244.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0120U100309, 0122U000439, 0119U002574

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Фрасинюк Михайло Сергійович
2. Mykhaylo S. Frasinyuk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3133-601X

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:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Хиля Ольга Володимирівна
2. Khylia Olha V.

Кваліфікація: к. б. 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

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: 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:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Виджак Роман Миколайович
2. Vydzhak Roman M.

Кваліфікація: к.х.н., с.н.с., 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:

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, буд. 1, 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	Смолій Олег Борисович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Смолій Олег Борисович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Шутко М.М
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна