Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0526U000010

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-01-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Черних Антон Вікторович
2. Anton V. Chernykh

Кваліфікація: к. х. н., н.с, 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-2292-4138

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.03

Назва наукової спеціальності: Органічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 12-02-2026

Спеціальність за освітою: Хімія. Викладач хімії

Місце роботи здобувача: 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:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.217.01

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: 31.21.21.07, 31.21.23, 31.21.27, 31.23.27

Тема дисертації:

1. Функціоналізовані малі карбоцикли та їх аналоги

2. Functionalized small carbocyclic compounds and their analogues

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена синтезу та дослідженню фізико-хімічних та біологічних властивостей, а також структурних параметрів малих функціоналізованих карбоциклічних сполук та їх гетероаналогів. Розроблено синтетичний підхід до одержання функціонально заміщених похідних малих циклічних систем та їх аналогів у мультиграмових кількостях. Методологія синтезу базувалася на дивергентному підході, що дозволяло отримувати якомога більше функціональне та стереохімічне різноманіття з найменшої кількості вихідних сполук. Увагу було приділено синтезу похідних спіро[3.3]гептану, спіро[2.3]гексану, 6-азабіцикло[3.1.1]гептану, 3-((гетеро)циклобутил)азетидину, 5-азаспіро[2.3]гексану, cis- і trans-1,3- та 1,2-дизаміщених похідних циклобутиламінів і карбонових кислот. Значно збільшено список доступних поліфункціоналізованих будівельних блоків, зокрема фторовмісних: похідні циклопропану, циклобутану та спіро[3.3]гептану, cis- і trans-циклопропанкарбонових кислот і циклопропіламінів, що містять CH2F-, CHF2- і

CF3-замісники, 3-фторо-, 3,3-дифторо-, 3-карбокси-3-фторо- та 3-трифторометилзаміщені похідні 6-азабіцикло[3.1.1]гептану, 6-фторо- та 6,6-дифтороспіро[3.3]гептанового каркасу тощо. За допомогою рентгеноструктурного аналізу та векторних діаграм на основі отриманих даних встановлено, що 1,5-дифункціоналізовані похідні спіро[2.3]¬гексану імітують □-вигин вторинної структури білків і отже є перспективними будівельними блоками для дизайну □-поворотних пептидоміметиків. Запропоновано дивергентний підхід для синтезу всіх регіо- та стереоізомерів аналогів глутамінової кислоти на основі спіро[3.3]гептанового каркасу. Окремі представники синтезованої бібліотеки протестовано на інгібуючу активність проти глутаматрансферази H. Pylori. Ключові слова: карбоцикли, будівельні блоки, біоізостери, функціональні групи, циклопропан, циклобутан, спіроциклічні сполуки, біциклічні сполуки.

2. This dissertation is devoted to the synthesis and study of physicochemical, structural and biological properties of small functionalized carbocyclic compounds and their heteroanalogues. A synthetic approach to the preparation of functionally substituted derivatives of small cyclic systems and their analogues in multigram quantities was developed. The synthesis methodology was based on the principle of divergent strategy, which allowed to obtain the greatest possible functional and stereochemical diversity from the smallest number of starting compounds. Attention was paid to the synthesis of derivatives of spiro[3.3]heptane, spiro[2.3]hexane, 6-azabicyclo[3.1.1]heptane, 3-((hetero)cyclobutyl)azetidine, 5-azaspiro[2.3]hexane, cis- and trans-1,3- and 1,2-disubstituted derivatives of cyclobutylamines and carboxylic acids. The list of available polyfunctionalized building blocks, in particular, fluorinated ones - mono-, di- and trifluoromethyl fragments in cyclopropane, cyclobutane and spiro[3.3]heptane, cis- and trans-cyclopropanecarboxylic acids and cyclopropylamines containing CH2F-, CHF2- and CF3-substituents, 3-fluoro-, 3,3-difluoro-, 3-carboxy-3-fluoro- and 3-trifluoromethyl-substituted derivatives of 6-azabicyclo[3.1.1]heptane, 6-fluoro- and 6,6-difluorospiro[3.3]heptane framework, etc. The X-ray crystallographic analysis and vector diagrams based on the data obtained have shown that 1,5-difunctionalized spiro[2.3]hexane derivatives mimic the □-sheet of the secondary structure of proteins and thus are promising building blocks for the design of □-turn peptidomimetics. A divergent approach was proposed for the synthesis of all regio- and stereoisomers of glutamic acid analogs based on the spiro[3.3]heptane backbone. Some individual members of the synthesized library were tested for inhibitory activity against H. Pylori. Analysis of the molecular structure of 3-substituted 6-azabicyclo[3.1.1]heptane derivatives using the EVP (exit vector parameters) method showed that the cis-isomer of 3-substituted 6-azabicyclo[3.1.1]heptanes are three-dimensional analogues of 1,4-disubstituted piperidine in the common ‘chair’ conformation, and the trans-isomer can be considered as an analogue of piperidine in the less common ‘boat’ conformation.

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:

- 1. Chernykh, A. V; Kudryk, O. V; Olifir, O. S.; Dobrydnev, A. V; Rusanov, E.; Moskvina, V. S.; Volochnyuk, D. M.; Grygorenko, O. O. Expanding the Chemical Space of 1,2-Difunctionalized Cyclobutanes. J. Org. Chem. 2023, 88, 3109–3131.
- 2. Malashchuk, A.; Demchuk, O. P.; Razhik, B. V; Holumbievskyi, V. O.; Kudryk, O. V; Chernykh, A. V; Hryshchuk, O. V; Sosunovych, B. S.; Volochnyuk, D. M.; Vashchenko, B. V; Grygorenko, O. O. 2- and 3-Fluorocyclobutane Building Blocks for Organic and Medicinal Chemistry. Eur. J. Org. Chem. 2024, 27, e202400493.

- 3. Chernykh, A. V.; Melnykov, K. P.; Tolmacheva, N. A.; Kondratov, I. S.; Radchenko, D. S.; Daniliuc, C. G.; Volochnyuk, D. M.; Ryabukhin, S. V.; Kuchkovska, Y. O.; Grygorenko, O. O. Last of the gem - Difluorocycloalkanes: Synthesis and Characterization of 2,2-Difluorocyclobutyl-Substituted Building Blocks. J. Org. Chem. 2019, 84, 8487–8496.
- 4. Demchuk, O. P.; Bobovskyi, B. V; Vashchenko, B. V; Hryshchuk, O. V; Skreminskyi, A.; Chernykh, A. V; Moskvina, V. S.; Hordiyenko, O. V; Volochnyuk, D. M.; Grygorenko, O. O. 3-Fluoroalkyl (CF3, CHF2, CH2F) Cyclobutane-Derived Building Blocks for Medicinal Chemistry: Synthesis and Physicochemical Properties. European J. Org. Chem. 2023, 26, e202300292.
- 5. Chernykh, A. V; Olifir, O. S.; Kuchkovska, Y. O.; Volochnyuk, D. M.; Yarmolchuk, V. S.; Grygorenko, O. O. Fluoroalkyl-Substituted Cyclopropane Derivatives: Synthesis and Physicochemical Properties. J. Org. Chem. 2020, 85, 12692–12702.
- 6. Chernykh, A. V.; Liashuk, O. S.; Kononenko, K. O.; Michuda, A. Y.; Olifir, O. S.; Lesyk, D.; Turenko, K.; Kozytskyi, A. V.; Shishkina, S. V.; Borysko, P.; Ryabukhin, S. V.; Volochnyuk, D. M.; Grygorenko, O. O. Synthesis and Physicochemical Properties of Functionalized cis-2-((Fluoro)alkyl)cyclobutanes. ChemPlusChem 2025, e202500150.
- 7. Malashchuk, A.; Chernykh, A. V.; Hurmach, V. V.; Platonov, M. O.; Onopchenko, O.; Zozulya, S.; Daniliuc, C. G.; Dobrydnev, A. V.; Kondratov, I. S.; Moroz, Y. S.; Grygorenko, O. O. Synthesis, Biological Evaluation, and Modeling Studies of 1,3-Disubstituted Cyclobutane-Containing Analogs of Combretastatin A4. J. Mol. Struct. 2020, 1210, 128025.
- 8. Feskov, I. O.; Chernykh, A. V.; Kondratov, I. S.; Klyachina, M.; Daniliuc, C. G.; Haufe, G. Cyclobutyl-Containing Rigid Analogues of Threonine: Synthesis and Physical Chemical Properties. J. Org. Chem. 2017, 82, 12863–12868.
- 9. Chernykh, A. V; Liashuk, O. S.; Hurieva, A. M.; Volochnyuk, D. M.; Grygorenko, O. O. Multigram Synthesis of 2-Azabicyclo[2.1.1]Hexane-1-Carboxylates (2,4-Methanoprolines) – Promising Bicyclic Proline Analogs. J. Org. Pharm. Chem. 2024, 22, 24–37.
- 10. Chernykh, A. V.; Vashchenko, B. V.; Shishkina, S. V.; Volochnyuk, D. M.; Grygorenko, O. O. 3-Substituted 6-Azabicyclo[3.1.1]Heptanes: Nonclassical Piperidine Isosteres for Drug Discovery. J. Org. Chem. 2024, 89, 10440–10450.
- 11. Chernykh, A. V.; Liashuk, O. S.; Hurieva, A. M.; Lesyk, D.; Holota, Yu.; Borysko, P.; Shishkina, S. V.; Volochnyuk, D. M.; Grygorenko, O. O. Fluorine-containing 6-Azabicyclo[3.1.1]heptanes: Bicyclic Piperidine Analogs for Drug Discoveryю Eur. J. Org. Chem. 2025, e202500022.
- 12. Feskov, I. O.; Chernykh, A. V.; Kuchkovska, Y. O.; Daniliuc, C. G.; Kondratov, I. S.; Grygorenko, O. O. 3-((Hetera)Cyclobutyl)Azetidines, “Stretched” Analogues of Piperidine, Piperazine, and Morpholine: Advanced Building Blocks for Drug Discovery. J. Org. Chem. 2019, 84, 1363–1371.
- 13. 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 □-amino acids: synthesis and isoelectric point evaluation. ChemistrySelect 2024, 9(31), e202402108. [
- 14. Malashchuk, A.; Chernykh, A. V; Perebyinis, M. Y.; Komarov, I. V; Grygorenko, O. O. Monoprotected Diamines Derived from 1,5-Disubstituted (Aza)Spiro[2.3]Hexane Scaffolds. Eur. J. Org. Chem. 2021, 2021, 6570–6579.
- 15. Chernykh, A. V.; Chernykh, A. V.; Radchenko, D. S.; Chheda, P. R.; Rusanov, E. B.; Grygorenko, O. O.; Spies, M. A.; Volochnyuk, D. M.; Komarov, I. V. A stereochemical journey around spirocyclic glutamic acid analogs. Org. Biomol. Chem. 2022, 20, 3183–3200.
- 16. Olifir, O. S.; Chernykh, A. V; Dobrydnev, A. V; Grygorenko, O. O.; Moroz, Y. S.; Voitenko, Z. V; Radchenko, D. S. Multigram Synthesis of Advanced 6,6-Difluorospiro[3.3]Heptane-Derived Building Blocks. Eur. J. Org. Chem. 2021, 2021, 6541–6550.
- 17. 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, 4897–4910.

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

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0121U100387 0125U002249 0124U003843

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Волочнюк Дмитро Михайлович
2. Dmytro M. Volochnyuk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-6519-1467

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. Чебанов Валентин Анатолійович
2. Chebanov Valentyn A.

Кваліфікація: д.х.н., член-кор.НАН України, професор, 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61072, 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, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Походило Назарій Тарасович

2. Nazarii T. Pokhodylo

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8222-5008

Додаткова інформація: Scopus ID: 21934949900

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Костюк Олександр Миколайович

2. Oleksandr Kostyuk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4326-4968

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:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ягупольский Юрій Львович
2. Yu. L. Yagupolskii

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

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:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Роженко Олександр Борисович
2. Oleksandr B. Rozhenko

Кваліфікація: д. 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, 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	Вовк Михайло Володимирович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Вовк Михайло Володимирович
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

