

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U100800

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-10-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Савич Олена Володимирівна

2. Olena V. Savich

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: 08-06-2023

Спеціальність за освітою: Хімія

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):** Наказ № 1302

**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 дослідження біологічних властивостей нових похідних 3-аміно-1,2,4-триазолу та 5-амінотетразолу
2. Synthesis and study of biological properties of new derivatives of 3-amino-1,2,4-triazole and 5-aminotetrazole

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена розробці паралельних методів синтезу 3-аміно-1,2,4-триазолів та 5-амінотетразолів, із подальшим дослідженням біологічних властивостей нових похідних цих сполук. Тема дисертаційного проекту є актуальною з огляду на розширення синтетично доступного хімічного простору різноманітно функціоналізованих гетероциклічних сполук, а також з точки зору полегшення знаходження первинних хітів із новим хемотипом у проектах пошуку лікарських засобів. Розроблені нами синтетичні підходи до одержання 3-аміно-1,2,4-триазолів та 5-амінотетразолів є придатними до паралельного проведення – тобто, синтезу у платах, що не потребує особливих умов проведення та виділення для більшості комбінацій вихідних речовин. Це також була одна із вимог, що висувалися нами до синтетичних підходів. При валідації запропонованих методів синтезу було отримано 176 нових 3-аміно-1,2,4-триазолів та

277 нових 5-амінотетразолів. Таким чином, ступінь успішності паралельних синтезів становила 76% та 69% відповідно. Будова одержаних речовин підтверджувалась за допомогою ЯМР-спектроскопії та мас-спектрометрії. Практичним значенням отриманих результатів є 2 нових синтетичних підходи до одержання похідних 3-аміно-1,2,4-триазолу та 5-амінотетразолу, що суттєво розширюють межі хімічного простору синтетично доступних молекул, які містять ці гетероцикли. Крім того, показані можливості застосування великих хімічних просторів на первинних етапах пошуку лікарських засобів.

2. This thesis is dedicated to the development of parallel synthesis protocols leading to 3-amino-1,2,4-triazoles and 5-aminotetrazoles, with further research of biological properties of the new derivatives of these compounds. The topic of this thesis is relevant since it concerns expansion of the known synthetically feasible chemical space of diversely substituted heterocyclic compounds, and also from the aspect of facilitation of the primary hits discovery on the early stages of the DD projects. The synthetic approaches to 3-amino-1,2,4-triazoles and 5-aminotetrazoles developed in this work are suitable for parallel chemistry – i.e, plate synthesis that does not require special conditions for the synthesis and purification for most of the combinations of starting materials. This was another requirement for the synthetic method that we have considered upon the research. Upon the validation of the proposed synthetic approaches, 176 new 3-amino-1,2,4-triazoles and 277 new 5-aminotetrazoles were synthesized. Success rate of the syntheses was 76% and 69%, correspondingly. Structure and purity of the obtained compounds was proved using NMR spectroscopy and LC/MS. For the accession of the selectivity of the binding, we have conducted analogous The practical significance of this work is 2 new synthetic approaches to 3-amino-1,2,4-triazoles and 5-aminotetrazoles that significantly expand the chemical space of the synthetically feasible molecules containing these heterocycles. In addition, the potential of the use of vast chemical spaces on the primary stages of the drug discovery projects has been shown.

### **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:** Нове вирішення актуального наукового завдання

### **Публікації:**

- 1. Bogolyubsky A. V., Savych O.V., Zhemera A.V., Pipko S.E., Grishchenko A.V., Konovets A.I., Doroshchuk R.O., Khomenko D.N., Brovarets V.S., Moroz Y.S., Vybornyi M. Facile One-pot Parallel Synthesis of 3-Amino-1,2,4-Triazoles. ACS Combinatorial Science. 2018. 20 (7). P.461–466.
- 2. Savych O., Kuchkovska Y.O., Bogolyubsky A.V., Konovets A.I., Gubina K.E., Pipko S.E., Zhemera A.V., Grishchenko A.V., Khomenko D.N., Brovarets V.S., Doroshchuk R., Moroz Y.S., Grygorenko O.O. One-pot Parallel Synthesis of 5-(Dialkylamino)Tetrazoles. ACS Combinatorial Science. 2019. 21 (9). P. 635–642
- Savych O.V., Gryniukova A.V., Aliksieieva D.O., Dziuba I.M., Borysko P.O., Dudenko D.V., Brovarets V.S., Moroz Y.S. The Iterative Application of a Large Chemical Space in the Drug Discovery Process. Journal of Organic and Pharmaceutical Chemistry. 2021. 19. P. 3–11

**Наукова (науково-технічна) продукція:**

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:** Планується до впровадження

**Зв'язок з науковими темами:** 1115U002587

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Броварець Володимир Сергійович
2. Volodymyr S. Brovarets

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

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Бондаренко Світлана Петрівна
2. Svitlana P. Bondarenko

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

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:** ;<https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7102249645>

**Повне найменування юридичної особи:** Національний університет харчових технологій

**Код за ЄДРПОУ:** 02070938

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, буд. 68, Київ, 01601, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Воловенко Юліан Михайлович

2. Yulian M. Volovenko

**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:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

**Рецензенти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Метелиця Лариса Олексіївна

2. Lapysa O. Metelitsia

**Кваліфікація:** д. б. н., с.н.с., 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:**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Колодяжна Анастасія Олегівна

2. Anastasiya O. Kolodiazhna

**Кваліфікація:** д. х. н., ст.н.с., 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:**

## **VIII. Заключні відомості**

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

Качковський Олексій Дмитрович

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

Качковський Олексій Дмитрович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

Шутко М.М

**Реєстратор**

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна