Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U000690

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-03-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ярмольчук Володимир Станіславович
2. Yarmolchuk Volodymyr S.

Кваліфікація: 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат 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: 19-02-2019

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.001.25

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Синтез функционализированных пирролидинов через реакцию 1,3-диполярного циклоприсоединения азометинових илидов.

2. Synthesis of functionalized pyrrolidines by the reaction of 1,3- [3+2]-cycloaddition of an azomethine ylide.

Реферат/анотація:

1. Диссертационная работа посвящена синтезу 2,5-незамещенных пирролидинов с помощью реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения азометиновых илидов к активированой C=C связи. Синтезированы новые производные пирролидинов (□-пролинов), в том числе и содержащие хиральные центры. Из полученного ряда изомерных □-трифторметилзамищених пирролидинов установлено, что введение трифторметильного заместителя в пирролидиновый фрагмент имело существенное влияние на значение pKa, logD и метаболическую стабильность синтезированных соединений. Впервые синтезирован неизвестный ранее монофторований аналог □-пролина - □-фтор-□-пролин и его простейшие N-защищенные производные. На основе □-фтор-□-пролина были получены новые хиральные монозахицени диамины, которые могут быть применены для моди-фикации биологически активних веществ. Синтезированы производные новой

гетероциклической системы - гексагидро-2H-тиен-[2,3-c]-пиррол-1,1-диоксида, которая является комбинацией пирролидино-вого и сульфоланового фрагментов.

2. Pyrrolidine is one of the most frequently used aliphatic amines in organic chemistry. This residue can be found in many bioactive compounds including nine FDA-approved drugs. It is not surprising therefore that substituted pyrrolidine analogues are valuable building blocks that are used in both drug discovery and agrochemistry projects. On the other hand, practical application of building blocks in pharmaceutical and agrochemical industry strongly depends not only on their conceptual attractiveness, but also on their chemical availability. Therefore, elaboration of short and high-yielding synthetic approaches to pyrrolidine analogues is important. For this purpose, new pyrrolidine derivatives (□-prolines), including those containing chiral centers, have been synthesized. The beneficial effects of fluorine as a substituent in organic compounds have stimulated intense research in organofluorine chemistry. The incorporation of fluorine, trifluoromethyl groups, or other fluorinated fragments into organic molecules can significantly change their physicochemical and biological properties. In particular, the trifluoromethyl substituent effectively influences the pKa of the neighboring functional groups, lipophilicity, solubility, conformational preferences, and hydrolytic and metabolic stabilities. Therefore, the trifluoromethyl group is widespread in bioactive compounds. Combination of the principles described above leads to conceptually attractive □-trifluoromethyl-substituted pyrrolidines. A practical synthetic approach to the construction of a library of three isomeric/homologous □-trifluoromethyl-substituted pyrrolidines is disclosed. All products were prepared in multigram quantities from a common precursor. The key synthetic step was a [3+2]-cycloaddition reaction. The influence of the trifluoro-methyl group on the physicochemical characteristics of the pyrrolidine fragment was studied. From the obtained series of isomeric □-trifluoromethyl substituted pyrrolidines it was established that the introduction of the trifluoromethyl substituent into the pyrrolidine fragment had a significant effect on the pKa, logD and metabolic stability of the synthesized compounds. We believe that □-trifluoro-methyl-substituted pyrrolidines will find applications in drug discovery and in agrochemistry as valuable building blocks, and in mechanistic studies as 19F NMR probes.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Комаров Ігор Володимирович
2. Komarov Igor V.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ягупольський Юрій Львович
2. Yagupolskii Yurii L.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.08

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кондратов Іван Сергійович
2. Kondratov Ivan S.

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.10

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

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

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.