

Рішення разової спеціалізованої вченої ради про присудження ступеня доктора філософії

Разова спеціалізована вчена рада Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара Міністерства освіти і науки України прийняла рішення про присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки на підставі прилюдного захисту дисертації «Циклічні сульфони та сульфонаміди з азагетероциклічними фрагментами» зі спеціальності 102 Хімія 23 січня 2024 року

Діль Катерина Володимирівна, 1994 року народження, громадянка України, освіта вища: закінчила у 2018 році Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара зі спеціальності 102 Хімія.

Навчалася в аспірантурі Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара з 2019 по 2023 роки.

Основна частина дисертаційної роботи виконана у Дніпровському національному університеті імені Олеся Гончара та під час стажування у ТОВ НВП «УКРОРГСИНТЕЗ».

Наукові керівник – Пальчиков Віталій Олександрович доктор хімічних наук, професор, професор кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії, директор НДІ хімії та геології Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара

Оковитий Сергій Іванович доктор хімічних наук, професор, професор кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії, ректор Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара

Здобувач має 8 публікації, серед яких 3 статті, які входять до наукометричної бази даних Scopus, 1 патент на корисну модель:

1. Kateryna Dil, Yevhenii Kozyriev, Vitalii Palchykov (2023). Rh-Catalyzed cyclization of carbamates – synthesis of a new heterocyclic system: tetrahydro-3H-4-oxa-2-thia-2b-azacyclopropa[c,d]pentalen-3-one-2,2-dioxide Chemical Papers, 77(11), P. 7249–7254 DOI: <https://doi.org/10.1007/s11696-023-03006-9> (Q2), (Scopus, Web of Science)

2. Kateryna Dil, Sergiy Okovytyy, Vitalii Palchykov (2023). 5-Aryl-7,8,9,10-tetrahydro-5H-tetrazolo[1,5-a]thiopyrano[3,2-d]pyrimidine-6,6-dioxides – a new heterocyclic ensemble via MCR approach. Journal of Chemistry and Technologies, 31(2), P. 411-418 DOI: <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v31i2.126304> (Scopus, Web of Science)

3. Vitalii Palchykov, Katerina Dil, Nazar Manko, Nataliya Finiuk, Olha Novikevych, Nazariy Pokhodylo (2022). Cage arylsulfonamides and their antimicrobial properties. Journal of Chemistry and Technologies, 30(1), P. 1-10 DOI: <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v30i1.246451> (Scopus, Web of Science)

4. Патент на корисну модель №152137 Україна, МПК8 (2006.01) C07D 335/00, C07D 335/02. Спосіб синтезу 3- і 4-((2-гідроксиетил)аміно)тетрагідро-2H-тіопіран-1,1-діоксидів / Діль К.В., Шевченко О.В., Пальчиков В.О. // № u202200725. Заявл. 18.02.2022; Опубл. 02.11.2022; Бюл. № 44. – 3 с. <https://base.uipv.org/searchINV/search.php?action=viewdetails&IdClaim=283620>

У дискусії взяли участь голова та члени разової спеціалізованої вченої ради та присутні на захисті фахівці.

Вишнікін Андрій Борисович, доктор хімічних наук, професор (Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, професор кафедри аналітичної хімії та хімічної технології). Зауважень немає

Сливка Михайло Васильович, доктор хімічних наук, професор кафедри органічної хімії Навчально-наукового інституту хімії та екології ДВНЗ «Ужгородський національний університет». Зауваження та запитання щодо змісту та оформлення дисертації.

1. В першому розділі нумерація сполук в перших трьох схемах відсутня і починається лише з четвертої схеми. В подальшому окремі схеми містять сполуки як з нумерацією, так і без номера, що приводить до плутанини і помилок – наприклад, в схемі 1.12 в другій реакції, в якій відсутня нумерація вихідних сполук, наплутані замісники Ar, R або ж в схемі 1.14 відсутня нумерація отриманого на першій стадії енаміну...і не зовсім зрозуміло чи автори [40] виділяли цю сполуку чи ні? Подібне питання виникає і до інших схем (1.10, 1.15, 1.35, 1.37).

2. Дисертантка використовує неогрунтоване поєднання наскрізної нумерації сполук та схем та їх нумерації в межах розділу. Варто було визначитись з одним принципом нумерації, а то, окрім плутанини виходять такі дивні речі: β -кетосульфону присвоєно два(!!!) номери: 1.67 – с. 48, с.55 (текст), рис. 2.5 та 2.67 – схеми 2.41, 2.42, а сполуки 1.85 (схема 2.43) в першому розділі взагалі не існує!...А наскрізна нумерація в межах підрозділу (розділ 3) – лише поглиблює плутанину і посилює важкість сприйняття!

3. На с. 61 вжито термін «швидка оптимізація», в результаті якої без жодних пояснень чи додаткової інформації наводяться оптимальні умови синтезу сполуки 3.1.93. Хотілось би більше інформації стосовно цього інноваційного процесу!...в роботі відсутні опис сполуки 3.1.92, схема 3.1.43 (згадано на с.61).

4. Структуру нової поліциклічної системи 4.1.109d варто було підтвердити також рентгено-структурним дослідженням (якщо не ростуть кристали, то модифікувати).

5. Для одержання сполук 2.86 дисертанткою описано три методики. Водночас, при описі переважної більшості сполук (16 із 17!), зокрема даних

виходу чи/та температури топлення, не вказано яким саме методом користувались. Аналогічно по одержанню сполуки 3.2.99 (використовували 4 методи).

6. В експериментальній частині немає інформації по окремих сполуках – якщо ці сполуки не вдалось виділити, про це слід було дати інформацію. Експеримент по визначенню біологічної активності слід наводити в 5 розділі, а не при обговоренні результатів.

Вищевказані зауваження та побажання не є принциповими, не носять систематичний характер і не впливають на основні наукові положення та загальне позитивне враження від роботи, не стосуються і не зменшують наукову та практичну цінність представленої дисертаційної роботи.

Половкович Святослав Володимирович, доктор хімічних наук, професор Національного університету «Львівська політехніка». При детальному ознайомленні з роботою можна сформулювати низку запитань, побажань та зауважень :

Зауваження щодо змісту та оформлення дисертації.

У роботі присутні незначні недоліки в оформленні:

- Автор активно використовувала скорочення по тексту дисертації, проте, не всі скорочення наведені у «ПЕРЕЛІКУ УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ», зокрема (БКР, МКР, ADMET та інші.).

- Анотація роботи у частині опису вмісту Розділу 2 не відображає опис результатів досліджень наведених у самій дисертаційній роботі. Після ознайомлення з анотацією не зрозуміло чому присвячений Розділ 2.

- Для кращого розуміння реалізації обраних синтетичних підходів та концепції наукового дослідження варто навести короткі висновки після другого розділу роботи.

- Не зрозуміло про які продукти Біджинеллі йдеться у другому абзаці на стор. 48.

- Нумерація сполук на схемах 2.41 та 2.42 не відповідає нумерації у тексті.

- На сторінці 74 некоректно використано один з варіантів перекладу терміну «drug», мабуть автор мав на увазі відповідник «ліки, лікарський засіб» та сторінка 82 «lead-oriented synthesis» відповідає «цілеспрямований синтез або лідер-орієнтований синтез».

- На сторінці 62 текст опису до схеми перетворення не відповідає схемі 3.1.45.

- На сторінці 62 в описі до схеми 3.1.46. автором вказано, що при проведенні перетворення використовували ароматичні альдегіди – це не відповідає нижче наведеній схемі перетворень. Можливо автор мав на увазі використання похідних 2-амінобензонітрилу.

- На схемах 3.1.46. та 3.1.47 наведено похідна заміщеного бензонітрилу, проте, виходячи з продуктів перетворень у якості реагенту автором використано похідні 2-амінобензонітрилу.

- На сторінці 69 неточність у наведенні структури реагенту 1.67.

Запитання:

- У розділі 2 описано дослідження реакції β -кетосульфону 1.67 з бензальдегідами та S,O,Se-сечовинами. Як ви пояснюєте, що за деяких умов проведення перетворення вами було ідентифіковано утворення суміші регіоізомерів. Що на вашу думку має основний вплив на співвідношення регіоізомерів.

- На основі даних яких досліджень вам вдалося ідентифікувати структури відповідних регіоізомерів продуктів 2.85, 2.86 (a-q).

- На початку роботи ви зазначаєте, що для синтезу ряду продуктів Біджинеллі ви використали S,O,Se-сечовини та ряд ароматичних альдегідів, що містять електронно акцепторні (EWG) і донорні (EDG) групи, проте, вивчаючи реакційну здатність Se-сечовин у реакції Біджинеллі ви обмежуєте їх вибірку до кількох представників з комбінаторного ряду. Чим зумовлено обмеження комбінаторного потенціалу досліджуваних перетворень.

- На рисунку 2.4 наведено порівняльне дослідження спектрів ЯМР ^1H (DMSO- d_6) O,S,Se-вмісних продуктів Біджинеллі 2.86a,g,n. Чи можете ви прокоментувати чим зумовлено зсув сигналів груп NH у досліджуваних продуктах і яку це може нести додаткову аналітичну інформацію.

- Чим зумовлено те, що незважаючи на високі показники прогнозованої активності *in silico* у дослідженнях *in vitro* тестувалась досить мала вибірка синтезованих похідних 4.3.1.110, 4.3.1.111, 4.3.1.112, 4.3.1.113 та 4.3.1.114.

Однак, вищевказані зауваження та побажання не є принциповими, не носять систематичний характер і не впливають на основні наукові положення та загальне позитивне враження від роботи, не стосуються і не зменшують наукову та практичну цінність представленої дисертаційної роботи.

Гапонов Олександр Олексійович, кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник НДЛ хімії та геології Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара. У процесі рецензування зауваження щодо змісту роботи та її оформлення не виникли. Проте у плані наукової дискусії хотілося б почути відповіді на нижче наведені запитання:

1. Чи була спроба розширити ряд нових азиридино-оксазолідинонів, синтезованих методом родій-каталізованої циклізації карбаматів?

2. В спектрах ЯМР синтезованих сполук дуже часто сигнали протонів сульфенової частини перекриваються із сигналами ДМСО та води. Чи не краще було б вимірювати спектри сполук в розчині дейтерохлороформу?

3. В ході дисертаційного дослідження вихідний 6-членний кетосульфон часто використовується в тих самих реакціях, які більш відомі для хімії 1,3-дикетонів. Яку спільну особливість мають β -кетосульфони та 1,3-дикетони, що робить можливим схожість їх хімічних властивостей?

4. Який тип гетероциклів, що синтезовані в ході проведення дисертаційного дослідження на вашу думку мають найбільш перспективний біологічний профіль?

Зауваження: дисертація містить ряд описок, невдалих виразів та граматичних помилок, але у цілому вони не мають принципового характеру та жодним чином не зменшують наукової і практичної цінності отриманих автором результатів.

Аніщенко Андрій Олександрович, кандидат хімічних наук, доцент кафедри фізичної, органічної та неорганічної хімії Дніпровського національного університету імені Олеся Гончара. У процесі рецензування виникли деякі зауваження щодо змісту роботи та її оформлення не виникли. Проте у плані наукової дискусії хотілося б почути відповіді на нижче наведені запитання.

1. Дисертація містить ряд орфографічних помилок, невдалих виразів та описок які мають бути виправлені.

2. Не зовсім зрозумілим є вибір оцтової кислоти як розчинника для проведення реакції Біджинеллі. Як Ви можете це прокоментувати?

3. Як саме була визначена регіохімія реакції гетероциклізації орто-амінонітрилів з β -кетосульфоном?

4. Чому при оцінці профілю можливої біологічної активності важливим показником є площа топологічної полярної поверхні молекули (TPSA)?

У цілому наведені дискусійні питання не мають принципового характеру та жодним чином не зменшують наукової і практичної цінності отриманих автором результатів.

Результати відкритого (онлайн) голосування:

«За» – 5

«Проти» – 0

На підставі відкритого (онлайн) голосування разова спеціалізована вчена рада присуджує Ділю Катерині Володимирівні ступінь доктора філософії з галузі знань 10 природничі науки зі спеціальності 102 Хімія

Голова разової
спеціалізованої вченої ради



Андрій ВИШНІКІН