

Видавнича група «Наукові перспективи»

Всеукраїнська Асамблея докторів наук із державного управління

Асоціація науковців України

«Наука і техніка сьогодні»

№ 13(54) 2025

Київ – 2025

Publishing Group «Scientific Perspectives»

Ukrainian Assembly of Doctors of Sciences in Public Administration

Association of Scientists of Ukraine

"Science and technology today"

№ 13(54) 2025

Kyiv – 2025



**«Наука і техніка сьогодні» (Серія «Педагогіка», Серія «Право», Серія «Економіка»,
Серія «Фізико-математичні науки», Серія «Техніка»):
журнал. 2025. № 13(54) 2025. С. 2763**



*Згідно наказу Міністерства освіти і науки України від 07.04.2022 № 320
журналу присвоєно категорію "Б" із економіки та педагогіки
(спеціальності – 015 - Педагогічні науки; 076 - Економічні науки)*

*Згідно наказу Міністерства освіти і науки України від 06.06.2022 № 530 журналу
присвоєно категорію "Б" із права (спеціальність – 081 Юридичні науки)*

*Згідно наказу Міністерства освіти і науки України від 10.10.2022 № 894 журналу присвоєно
категорію "Б" із техніки (спеціальність - 122 Комп'ютерні науки)*

*Журнал видається за підтримки Міждержавної гільдії інженерів консультантів, Інституту філософії та
соціології Національної Академії Наук Азербайджану (Баку, Азербайджан), громадської організації
«Християнська академія педагогічних наук України» та громадської організації
«Всеукраїнська асоціація педагогів і психологів з духовно-морального виховання»*

*Рекомендовано до видавництва Президією Всеукраїнської Асамблеї докторів наук з державного управління
(Рішення від 24.12.2025 № 9/12-25)*



Журнал включено до міжнародної наукометричної бази Index Copernicus (IC), міжнародної пошукової системи Google Scholar та до міжнародної наукометричної бази даних Research Bible



Головний редактор: Сопілко Ірина Миколаївна - доктор юридичних наук, професор, Відмінник освіти України, Лауреат Премії Президента України для молодих вчених, Лауреат Премії Верховної Ради України найталановитішим молодим ученим в галузі фундаментальних і прикладних досліджень та науково-технічних розробок, академік Академії наук вищої школи України, Заслужений юрист України (Київ, Україна)

Редакційна колегія:

- Бахов Іван Степанович — доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри іноземної філології та перекладу Міжрегіональної академії управління персоналом (Київ, Україна)
- Будник Вікторія Анатоліївна - кандидат економічних наук, професор, професор кафедри бізнес-логістики та транспортних технологій Державного університету інфраструктури та технологій (Київ, Україна)
- Войтасик Андрій Миколайович – кандидат технічних наук за спеціальністю системи та процеси керування, доцент кафедри електричної інженерії суднових та роботизованих комплексів Національного університету кораблебудування імені адмірала Макарова (м. Миколаїв, Україна), Віце-академік громадської наукової організації «Академія технічних наук України» (Івано-Франківськ, Україна)
- Волк Павло Павлович — доцент кафедри водної інженерії та водних технологій Національного університету водного господарства та природокористування (Рівне, Україна)
- Воробйов Яків Анатолійович – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри математики, інформатики та інформаційної діяльності Ізмаїльського державного гуманітарного університету, учасник бойових дій, член громадської організації «Міжнародна фундація науковців та освітян», автор наукових публікацій та навчально-методичних матеріалів у галузі математики, прикладної математики, інформаційних технологій та педагогіки;
- Гирка Ольга Ігорівна - кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри товарознавства, митної справи та управління якістю Львівського торговельно-економічного університету (Львів, Україна)
- Гнатюк Сергій Олександрович - кандидат технічних наук, доцент, заступник декана факультету аеронавігації, електроніки та телекомунікацій Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Дівізніок Михайло Михайлович - доктор фізико-математичних наук, професор, Завідувач відділу Відділу цивільного захисту та інноваційної діяльності Державної установи "Інститут геохімії навколишнього середовища Національної академії наук України" (Київ, Україна)
- Дяденчук Альона Федорівна - кандидат технічних наук, старший викладач кафедри вищої математики і фізики Таврійського державного агротехнологічного університету імені Дмитра Моторного (Мелітополь, Україна)
- Забулонов Юрій Леонідович - доктор технічних наук, професор, Член-кореспондент НАН України, директор Державної установи «Інститут геохімії навколишнього середовища Національної академії наук України» (Київ, Україна)
- Ільїн Валерій Юрійович - доктор економічних наук, професор (Київ, Україна)

- Ільїна Анастасія Олександрівна - кандидат економічних наук, доцент, доцент кафедри публічного управління і адміністрування Національного торговельно-економічного університету (Київ, Україна)
- Кардаш Оксана Любомирівна — кандидат економічних наук, доцент кафедри комп'ютерних технологій та економічної кібернетики Навчально-наукового інституту автоматики, кібернетики та обчислювальної техніки Національного університету водного господарства та природокористування (м. Рівне, Україна)
- Квасніков Володимир Павлович — доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри комп'ютеризованих електротехнічних систем та технологій Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Коваленко Валентин Васильович - доктор юридичних наук, професор, провідний науковий співробітник сектору авторського права та суміжних прав лабораторії авторського права та інформаційних технологій Науково-дослідного центру судової експертизи з питань інтелектуальної власності Міністерства юстиції України (Київ, Україна)
- Коваленко Олена Михайлівна - кандидат педагогічних наук, провідний науковий співробітник відділу профільного навчання Інституту педагогіки НАПН України (Київ, Україна)
- Комнатний Сергій Олександрович - докторант кафедри філософії права та юридичної логіки Національної академії внутрішніх справ (Київ, Україна)
- Коробкова Олена Миколаївна - кандидат економічних наук, доцент кафедри «Експлуатація портів і технологія вантажних робіт» Одеського національного морського університету, засновниця Навчального центру з підготовки та підвищення кваліфікації митних брокерів в Україні, експерт з митної справи, член Асоціації митних брокерів в Україні, дійсний Віце академік громадської організації «Академія технічних наук України», Member of International federation of customs brokers association (USA)
- Кравчук Володимир Миколайович — доктор юридичних наук, доцент, доцент кафедри конституційного, адміністративного та міжнародного права Волинського національного університету імені Лесі Українки (Луцьк, Україна)
- Кузьмич Людмила Володимирівна - доктор технічних наук, головний науковий співробітник Інституту водних проблем і меліорації Національної академії аграрних наук України (Київ, Україна)
- Куніцький Сергій Олегович - кандидат технічних наук, старший дослідник, провідний науковий співробітник науково-дослідної частини Національного університету водного господарства та природокористування (Рівне, Україна)
- Лук'ячук Олександр Петрович — кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри будівельних, дорожніх, меліоративних, сільськогосподарських машин та обладнання Національного університету водного господарства та природокористування (Рівне, Україна)
- Маджд Світлана Михайлівна - доктор технічних наук, професор, професор кафедри зеленої економіки та економіки природокористування Державної екологічної академії післядипломної освіти та управління (Київ, Україна)
- Мануель Давид Массено - доцент відділу права та захисту даних, старший науковий співробітник і член координаційного комітету лабораторії UbiNET, запрошений член PDPC, член-консультант комісії цифрового права муніципальних адвокатських колегій Кампінаса та Прая-Гранде (Сан-Паулу), а також Комісії з інновацій, управління та технологій муніципальної адвокатської колегії Гуарульюса, коментатор IODA, почесний член IDEIA Institute, член Наукового комітету MICHN, член EDEN, член-кореспондент RedNAC, член UMAU, член-кореспондент UBAU (Португалія)
- Микитин Тарас Миронович - кандидат технічних наук, завідувач кафедри менеджменту Рівненського державного гуманітарного університету (Рівне, Україна)
- Миргород-Карпова Валерія Валеріївна - кандидат юридичних наук, заступник директора з наукової роботи, старший викладач кафедри адміністративного, господарського права та фінансово-економічної безпеки Сумського державного університету (Суми, Україна)
- Мізюк Вікторія Анатоліївна – кандидат педагогічних наук, доцент, декан факультету управління, адміністрування та інформаційної діяльності Ізмаїльського державного гуманітарного університету (Ізмаїл, Україна)
- Мірошніченко Валентина Іванівна - доктор педагогічних наук, професор, завідувач кафедри психології, педагогіки та соціально-економічних дисциплін Національної академії Державної прикордонної служби України імені Богдана Хмельницького (Хмельницький, Україна)
- Міхальський Томаш — доктор наук, доцент кафедри географії регіонального розвитку Гданського університету (Польща)
- Огієнко Микола Миколайович - кандидат технічних наук, професор кафедри організації авіаційних робіт та послуг Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Одарченко Роман Сергійович - завідувач кафедри телекомунікаційних та радіоелектронних систем Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Олексенко В'ячеслав Михайлович – доктор педагогічних наук, кандидат фізико-математичних наук, професор, професор кафедри вищої математики Національного технічного університету «Харківський політехнічний інститут» (Харків, Україна)
- Оніщенко Наталія Миколаївна - доктор юридичних наук, професор, Заслужений юрист України, академік НАПрН України, завідувач відділу теорії держави і права Інституту держави і права ім. В.М.Корецького НАН України (Київ, Україна)
- Опанасенко Володимир Миколайович — доцент кафедри комп'ютеризованих електротехнічних систем та технологій Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Ордановська Олександра Ігорівна – доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» (Одеса, Україна)
- Охріменко (Жмурко) Тетяна Олександрівна - старший науковий співробітник кафедри комп'ютеризованих систем управління Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Павлов Костянтин Володимирович — доктор економічних наук, професор, завідувач кафедри підприємництва і маркетингу Волинського національного університету імені Лесі Українки (Луцьк, Україна)
- Паскаль Олена Вікторівна - кандидат педагогічних наук, доцент кафедри педагогічних технологій початкової освіти Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» (Одеса, Україна)
- Поліщук Віталій Васильович — кандидат сільськогосподарських наук, завідувач відділу зрошення, відділення меліорації Інституту водних проблем і меліорації Національної академії аграрних наук України (Київ, Україна)
- Пономаренко Лілія Петрівна – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри Загальної фізики Фізико-математичного факультету Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» (Київ, Україна)
- Приходькіна Наталія Олексіївна - доктор педагогічних наук, професор кафедри педагогіки, адміністрування і спеціальної освіти Навчально-наукового інституту менеджменту та психології ДЗВО «Університет менеджменту освіти» НАПН України (Київ, Україна)

- Стахова Анжеліка Петрівна — старший викладач кафедри комп'ютеризованих електротехнічних систем та технологій Національного авіаційного університету (Київ, Україна)
- Турчинова Ганна Володимирівна — кандидат педагогічних наук, доцент, декан факультету природничо-географічної освіти та екології Національного педагогічного університету імені М.П. Драгоманова (Київ, Україна)
- Удодова Яна Вадимівна – кандидат економічних наук, доцент кафедри обліку та оподаткування Запорізького національного університету (Запоріжжя, Україна)
- Фесенко Андрій Олексійович - кандидат технічних наук, асистент кафедри кібербезпеки та захисту інформації Київського національного університету імені Тараса Шевченка. (Київ, Україна)
- Черненко Варвара Петрівна - кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри інформатики і вищої математики Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського (Кременчук, Україна)
- Чернуха Надія Миколаївна — доктор педагогічних наук, професор, професор кафедри соціальної реабілітації та соціальної педагогіки Київського національного університету імені Тараса Шевченка (Київ, Україна)
- Чумак Оксана Володимирівна - доктор економічних наук, доцент, науковий співробітник відділу статистики і аналітики вищої освіти Державної наукової установи «Інститут освітньої аналітики», (Київ, Україна)
- Шандра Наталія Андріївна - кандидат педагогічних наук, доцент кафедри іноземних мов для природничих факультетів Львівського національного університету імені Івана Франка (Львів, Україна)
- Шеремет Інеса Володимирівна - кандидат педагогічних наук, доцент, доцент кафедри медикобіологічних та валеологічних основ охорони життя і здоров'я Національного педагогічного університету ім. М. П. Драгоманова (Київ, Україна)
- Якимчук Аліна Юріївна - доктор економічних наук, професор, Академік економічних наук України, професор кафедри державного управління, документознавства та інформаційної діяльності Національного університету водного господарства та природокористування (Рівне, Україна)
- Якимчук Олег Феодосійович - керівник групи білінгу Відділу бізнес-систем Департаменту інформаційних технологій ПРАТ «Рівнеобленерго» (Рівне, Україна)
- Яцишин Андрій Васильович - доктор технічних наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник Відділу цивільного захисту та інноваційної діяльності Державної установи "Інститут геохімії навколишнього середовища Національної академії наук України" (Київ, Україна)

Статті розміщені в авторській редакції. Відповідальність за зміст та орфографію поданих матеріалів несуть автори.

ЗМІСТ

СЕРІЯ «Право»

Olytska O., Prokopchenko T. <i>LEGAL GUARANTEES FOR THE SOCIAL PROTECTION OF PARTICIPANTS IN OPERATIONAL-INVESTIGATIVE ACTIVITIES</i>	31
Rizenko O.V., Luppa Yu.S. <i>GENERAL THEORY OF MEDIATION IN LAW</i>	43
Romanova A.S. <i>LEGAL STATUS OF ENTITIES OF FIDUCIARY RELATIONS</i>	51
Андрухів О.І. <i>ЕВОЛЮЦІЯ КОНЦЕПЦІЇ ПРАВ ЛЮДИНИ В УМОВАХ ЗБРОЙНОГО КОНФЛІКТУ: УКРАЇНСЬКИЙ ТА МІЖНАРОДНИЙ ДОСВІД</i>	60
Баїк О.І. <i>СУДОВА ПРАКТИКА КОНСТИТУЦІЙНОГО СУДУ УКРАЇНИ У СФЕРІ СОЦІАЛЬНОГО ЗАХИСТУ НАСЕЛЕННЯ</i>	73
Бизов С.С. <i>ЄВРОПЕЙСЬКА МОДЕЛЬ ПРОФСПІЛКОВИХ СИСТЕМ: ПРАВОВИЙ АНАЛІЗ ДОСВІДУ НІМЕЧЧИНИ, ФРАНЦІЇ, ПОЛЬЩІ ТА ШВЕЦІЇ</i>	89
Болокан І.В. <i>ПРЕДМЕТ ДОГОВОРІВ ПРО НАДАННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ ПОСЛУГ: АКТУАЛЬНІ ПИТАННЯ НОРМАТИВНОГО РЕГУЛЮВАННЯ</i>	102
Бондарчук-Ладна О.В. <i>ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ПРАВОВОГО СТАТУСУ ДІТЕЙ-СИРИТ ТА ДІТЕЙ, ПОЗБАВЛЕНИХ БАТЬКІВСЬКОГО ПІКЛУВАННЯ, В УМОВАХ ВОЄННОГО СТАНУ: ПРОБЛЕМИ ТА ШЛЯХИ ВДОСКОНАЛЕННЯ</i>	115

Частоколенко І.П., Газдун Н.В. 2656
АРХІТЕКТУРА ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ БЕЗПЕКИ API В МІКРО-СЕРВІСНИХ ВЕБ-СИСТЕМАХ

Чередник В.М., Якусевич Ю.Г., Колесник В.В. 2665
МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОПРИВОДУ ГРЕБНОГО ГВИНТА РЕГУЛЬОВАНОГО КРОКУ ДЛЯ ЗАДАЧ АВТОМАТИЗАЦІЇ ТА ТРЕНАЖЕРНОЇ ПІДГОТОВКИ

Чиркова К.С., Дробишев О.С. 2680
ГІБРИДНИЙ КОНТЕКСТУАЛЬНИЙ МЕТОД ПОБУДОВИ ЧАТ-БОТІВ В ОСВІТНІХ CRM-СИСТЕМАХ

Шевчук О.Ф., Павлюк П.П., Козловський А.В., Паночишин Ю.М., Сімончук С.В. 2696
СТАТИСТИЧНИЙ АНАЛІЗ СПЕЦІАЛІЗОВАНОГО НАБОРУ ДАНИХ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ КИСЛОТНО-ОСНОВНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ І ЛІПОФІЛЬНОСТІ ФТОРОВАНИХ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК

Яровий А.А., Озеранський В.С., Петришин С.І., Ваховська Л.М., Заїкін П.І. 2710
ОСОБЛИВОСТІ РЕАЛІЗАЦІЇ ІНФОРМАЦІЙНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ НАДАННЯ РЕКОМЕНДАЦІЙ З ВІЙСЬКОВОГО ОБЛІКУ

СЕРІЯ «ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ»

Білак Ю.Ю., Геращенко Е.В. 2722
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНА ПАРАЛЕЛЬНА АРХІТЕКТУРА АДАПТИВНОГО ЧИСЕЛЬНОГО МОДЕЛЮВАННЯ СКЛАДНИХ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ НА ОСНОВІ БАГАТОРІВНЕВОЇ ДЕКОМПОЗИЦІЇ

Кшиванський О.О., Пугач В.М. 2744
СИМУЛЯЦІЯ ПРОТОТИПУ СИСТЕМИ РАДІАЦІЙНОГО МОНІТОРИНГУ ДЛЯ ЕКСПЕРИМЕНТУ СВМ

Самусь В.М. 2755
ШУМОСТІЙКИЙ АНАЛІЗ ЕЛЕКТРОКАРДІОГРАМ НА ОСНОВІ АДАПТИВНОГО ЗЛИТТЯ ОЗНАК ІЗ УРАХУВАННЯМ КЛІНІЧНОГО КОНТЕКСТУ

УДК 004.852:547.96

[https://doi.org/10.52058/2786-6025-2025-13\(54\)-2696-2709](https://doi.org/10.52058/2786-6025-2025-13(54)-2696-2709)

Шевчук Олександр Федорович кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри комп'ютерних наук, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, <https://orcid.org/0000-0002-8600-0700>

Павлюк Петро Петрович студент факультету інтелектуальних інформаційних технологій та автоматизації, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця

Козловський Андрій Володимирович кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри комп'ютерних наук, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, <https://orcid.org/0000-0001-9697-1511>

Паночишин Юрій Миколайович кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри комп'ютерних наук, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, <https://orcid.org/0000-0003-1546-3422>

Сімончук Сергій Володимирович асистент кафедри комп'ютерних наук, Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця, <https://orcid.org/0009-0000-7295-5357>

СТАТИСТИЧНИЙ АНАЛІЗ СПЕЦІАЛІЗОВАНОГО НАБОРУ ДАНИХ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ КИСЛОТНО-ОСНОВНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ І ЛІПОФІЛЬНОСТІ ФТОРОВАНИХ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК

Анотація. Фтор є ключовим елементом у фармацевтичній та органічній хімії завдяки своїм унікальним електронним і просторовим властивостям, які істотно впливають на фізико-хімічні характеристики органічних сполук. Введення атомів фтору або фторвмісних груп змінює кислотно-основні властивості, ліпофільність та конформаційну стабільність молекул, що ускладнює їхнє прогнозування.

У роботі проведено аналіз спеціалізованого набору даних (датасету) експериментальних значень pK_a та $\log P$ для 183 насичених фторованих органічних сполук, включаючи первинні та вторинні аміни, карбонові кислоти та їх модельні похідні, з метою оцінки закономірностей впливу фтору на фізико-хімічні властивості та перевірки придатності набору для високоточного

моделювання. Датасет охоплює широкий спектр структурних класів – моноциклічні, біциклічні та ациклічні системи та різноманітні фторовані замісники, що дозволяє оцінювати вплив кількості та просторового розташування атомів фтору на кислотно-основні властивості і ліпофільність молекул.

Проведено комплексну попередню обробку даних, включаючи видалення аномальних викидів із застосуванням тесту Шапіро-Вілکا, критерія z-score та методу інтерквартильного розмаху, а також стратифікований поділ на навчальну (80 %) і тестову (20 %) підмножини з контролем структурної подібності молекул за коефіцієнтом Танімото ($\geq 90\%$).

Аналіз цільових змінних виявив бімодальний розподіл рKa для амінів та карбонових кислот і більш рівномірний розподіл logP. Було встановлено систематичне зниження рKa вторинних амінів зі збільшенням числа атомів фтору та наближенням їх до основного центру депротонування, тоді як вплив фторування на карбонові кислоти та logP характеризується складними нелінійними закономірностями, що включають позиційні та кооперативні ефекти.

Застосування графових нейронних мереж на розглянутому датасеті показало високу точність прогнозування значень рKa та logP. Таким чином отримані дані підтверджують придатність сформованого датасету для розвитку високоточних моделей прогнозування кислотно-основних властивостей і ліпофільності фторованих органічних сполук, забезпечують можливість врахування електронних, просторових і конформаційних ефектів фторування, а також відкривають перспективи для його застосування у фармацевтичних дослідженнях і фундаментальній хімії.

Ключові слова: датасет, обробка даних, прогнозування, машинне навчання, графові нейронні мережі.

Shevchuk Oleksandr Fedorovich Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department for Computer Science, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, <https://orcid.org/0000-0002-8600-0700>

Pavliuk Petro Petrovych Master of the Department for Computer Science, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia

Kozlovskiy Andrii Volodymyrovych Candidate of Engineering Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department for Computer Science, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, <https://orcid.org/0000-0001-9697-1511>

Panochyshyn Yurii Mykolaiovych Candidate of Engineering Sciences, Associate Professor, Associate Professor at the Department for Computer Science, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, <https://orcid.org/0000-0003-1546-3422>

Simonchuk Serhii Volodymyrovych Master of Computer Science, Assistant at the Department for Computer Science, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, <https://orcid.org/0009-0000-7295-5357>

STATISTICAL ANALYSIS OF A SPECIALIZED DATASET FOR PREDICTING THE ACID–BASE PROPERTIES AND LIPOPHILICITY OF FLUORINATED ORGANIC COMPOUNDS

Abstract. Fluorine is a key element in pharmaceutical and organic chemistry due to its unique electronic and spatial properties, which significantly influence the physicochemical characteristics of organic compounds. The introduction of fluorine atoms or fluorinated groups alters acid–base properties, lipophilicity, and conformational stability of molecules, complicating their accurate prediction. In this work, we analyzed a specialized dataset of experimental pKa and logP values for 183 saturated fluorinated organic compounds, including primary and secondary amines, carboxylic acids, and their model derivatives, in order to evaluate the patterns of fluorine influence on physicochemical properties and to assess the dataset's suitability for high-precision modeling. The dataset covers a broad range of structural classes – monocyclic, bicyclic, and acyclic systems – and diverse fluorinated substituents, enabling evaluation of the effects of the number and spatial arrangement of fluorine atoms on acid–base properties and lipophilicity. A comprehensive data preprocessing workflow was performed, including outlier removal using the Shapiro–Wilk test, z-score criterion, and interquartile range method, as well as stratified splitting into training (80 %) and test (20 %) subsets with control for structural similarity based on the Tanimoto coefficient ($\geq 90\%$). Analysis of the target variables revealed a bimodal distribution of pKa for amines and carboxylic acids and a more uniform distribution of logP.

A systematic decrease in pKa was observed for secondary amines with increasing number of fluorine atoms and their proximity to the deprotonation center, whereas the effects of fluorination on carboxylic acids and logP exhibited complex nonlinear patterns, including positional and cooperative effects. Application of graph neural networks to this dataset demonstrated high predictive accuracy for both pKa and logP values. These results confirm the suitability of the dataset for developing high-precision predictive models of acid–base properties and lipophilicity of fluorinated organic compounds, allowing consideration of electronic, spatial, and

conformational effects of fluorination and providing prospects for its application in pharmaceutical research and fundamental chemistry.

Keywords: dataset, data preprocessing, prediction, machine learning, graph neural networks.

Постановка проблеми. У фармацевтичній та органічній хімії фтор займає особливе місце завдяки поєднанню малих атомних розмірів, високої електронегативності та здатності істотно модифікувати фізико-хімічні характеристики органічних сполук. Введення атома фтору або фторвмісної групи у структуру молекули суттєво впливає на її кислотно-основні властивості, ліпофільність, конформаційну стабільність та біологічну активність. Такі зміни зумовлені поєднанням індуктивних та мезомерних ефектів, що перерозподіляють електронну густину в реакційно-активних центрах молекул [1].

Попри значний інтерес до фторвмісних сполук, передбачення їхніх властивостей залишається складним завданням.

Більшість моделей прогнозування базуються на загальних хімічних базах даних, які не враховують специфічних електронних і просторових ефектів фторування.

У результаті такі моделі часто демонструють знижену точність для насичених фторованих похідних. До ключових чинників, що ускладнюють побудову точних моделей, належать:

1. Нелінійний характер впливу фтору, через який прості лінійні або квазілінійні моделі не здатні адекватно відтворити зміни фізико-хімічних параметрів.

2. Позиційна залежність ефектів фторування: властивості сполуки істотно змінюються залежно від того, де саме в молекулі розташовано атоми фтору або групи CF_x .

3. Кооперативні ефекти у поліфторованих структурах, коли сумарний вплив кількох атомів фтору не є простою сумою окремих внесків, а формується внаслідок їх взаємодії.

Унаслідок дії цих факторів стандартні алгоритми оцінки $\log P$ та pK_a показують недостатню точність щодо фторвмісних амінів і карбонових кислот. Відтак виникає потреба у формуванні спеціалізованого набору даних, орієнтованого саме на фторовані та нефторовані сполуки цього класу, що дозволить створювати більш надійні та інформативні моделі прогнозування [2].

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Аналіз сучасних літературних джерел показує, що навіть найбільші публічні хімічні бази даних, такі як ChEMBL, PubChem, ZINC тощо, хоча й містять мільйони структур, мають доволі обмежену кількість експериментально охарактеризованих насичених фторованих сполук. Зокрема, систематичні ряди фторованих циклоалканів, та

їх похідних з експериментально виміряними значеннями pK_a та $\log P$ зустрічаються поодинокі.

Унаслідок цього більшість загальних моделей, натренованих на загальних датасетах, демонструють низьку точність при застосуванні до фторорганічних сполук. Дослідження показують, що традиційні методи обчислення ліпофільності, зокрема Crippen $\log P$, реалізований в RDKit, для ряду насичених фторованих похідних дають негативні значення R^2 , що свідчить про систематичні похибки прогнозування та відсутність кореляції між експериментальними та передбаченими значеннями [2]. Комерційні програмні засоби, такі як ChemAxon, демонструють помітно кращу, хоча й досі недостатньо стабільну точність для pK_a фторвмісних сполук, особливо у випадках поліфторованих систем, де проявляються складні кооперативні ефекти.

Ці результати стимулюють розвиток спеціалізованих підходів, у межах яких ключова гіпотеза полягає в тому, що моделі, навчені на цільових і ретельно підібраних наборах даних, здатні набагато точніше відтворювати електронні, просторові та конформаційні ефекти фторування.

У цьому контексті в дослідженні [2] було сформовано спеціалізований датасет експериментальних значень pK_a та $\log P$ для насичених фторованих сполук на основі попередніх досліджень [3-12]. Для даного набору використання сучасних алгоритмів машинного навчання, зокрема графових нейронних мереж, продемонструвало високу точність і відтворюваність прогнозування. Створений датасет опубліковано у відкритому доступі [13], а на його основі розроблено відповідну інформаційну технологію [14] та веб-застосунок [15] який забезпечує високу прогностичну точність у поєднанні з інтуїтивно зрозумілим інтерфейсом.

Разом із тим, варто зазначити, що сформований датасет залишається відносно невеликим – 183 сполуки, що накладає певні обмеження на потенціал моделювання та загальність одержуваних висновків. Обмежений обсяг даних зумовлює необхідність особливо ретельного підходу до їх статистичного аналізу, оцінки збалансованості, нормалізації та перевірки внутрішньої узгодженості.

Крім того, відкритим залишається питання подальшого розширення експериментальної бази, інтеграції додаткових структурних дескрипторів і визначення оптимальних архітектур моделей, здатних найточніше відображати специфічні ефекти фторування.

У зв'язку з цим **метою** даної статті є комплексний аналіз структурних, статистичних та якісних характеристик спеціалізованого набору даних, призначеного для прогнозування кислотно-основних властивостей (pK_a) та ліпофільності ($\log P$) фторованих органічних сполук.

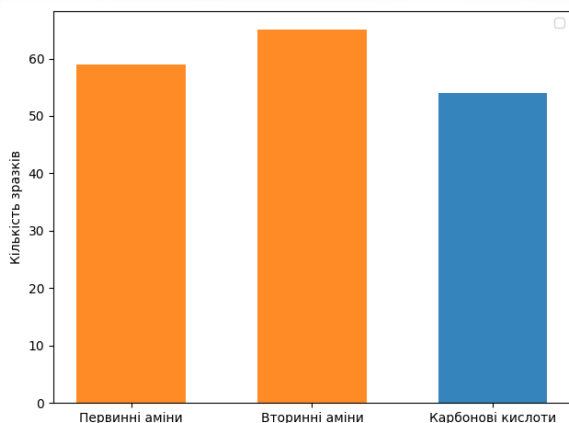
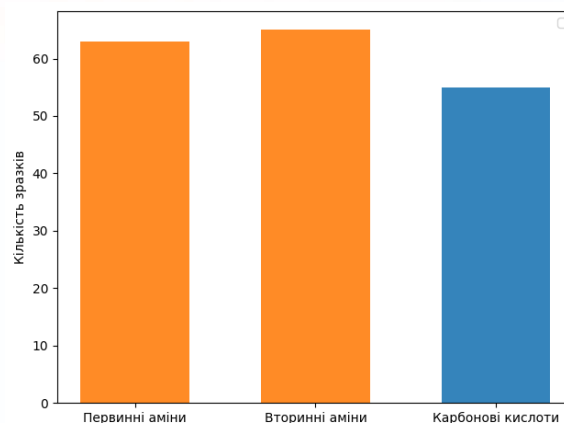
Такий аналіз покликаний оцінити наявні обмеження, виявити ключові закономірності та перевірити первинну придатність цього набору для подальшої розробки високоточних моделей прогнозування.

Виклад основного матеріалу. На рис. 1 представлено структуру спеціалізованого набору даних, що був розроблений для прогнозування кислотно-основних властивостей (pKa) та ліпофільності (logP) фторованих органічних сполук [13]. Дані сформовано на основі експериментально перевірених джерел, що забезпечує узгодженість методик та високу точність вимірювань. Датасет охоплює ключові структурні класи, релевантні для фармацевтичної хімії.

Entry	F Group	Amine/Acid ID	Amine/Acid SMILES	pKa	F Group Weight	Amide ID	Amide SMILES	logP	F Group Weight.1
0	NaN	NaN	PRIMARY AMINES	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
1	1.0	H	1{2,0}	NC	10,78	4{2,0}	CNC(=O)C1=CC=CC=C1	1,03	NaN
2	2.0	H	1{2,0}	NCC	10,75	4{2,0}	CCNC(=O)C1=CC=CC=C1	1,31	NaN
3	3.0	H	1{2,0}	NCCC	10,03	4{2,0}	CCCNC(=O)C1=CC=CC=C1	1,72	NaN
4	4.0	H	1{2,0}	CCCCN	10,5	4{2,0}	CCCCNC(=O)C1=CC=CC=C1	2,23	NaN
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
181	179.0	F^F	β-3{13,6}	OC(C1C2(CC2)C1(F)F)=O	3,51	β-6{13,6}	FC1(F)C(C(=O)NC2=CC=CC=C2)C11CC1	2,42	0.023
182	180.0	F^F	δ-3{13,6}	OC(C1C2(CC2(F)F)C1)=O	3,85	δ-6{13,6}	FC1(F)CC11CC1C(=O)NC1=CC=CC=C1	2,66	0.173
183	181.0	F^F	ε-3{14,6}	O=C(O)C(C1)CC21CC(F)(F)C2	4,35	ε-6{14,6}	FC1(F)CC2(CC(C2)C(=O)NC2=CC=CC=C2)C1	2,93	-0.379
184	182.0	F^F	cis-δ-3{15,6}	OC([C@H]1C[C@H]2C(F)(F)[C@H]2C1)=O	3,8	cis-δ-6{15,6}	FC1(F)[C@H]2C[C@H](C[C@H]12)C(=O)NC1=CC=CC=C1	2,37	-0.192
185	183.0	F^F	trans-δ-3{15,6}	OC([C@H]1C[C@H]2C(F)(F)[C@H]2C1)=O	3,76	trans-δ-6{15,6}	FC1(F)[C@H]2C[C@H](C[C@H]12)C(=O)NC1=CC=CC=C1	2,88	-0.056

Рис. 1. Структура спеціалізованого набору даних для прогнозування pKa та logP фторованих органічних сполук

Для аналізу кислотно-основних властивостей (pKa) до датасету увійшли 59 первинних екзоциклічних амінів (клас 1), 65 вторинних гетероциклічних амінів (клас 2) та 54 карбонових кислоти (клас 3) (рис. 2). Через експериментальні обмеження вимірювання logP було необхідно використовувати модельні похідні, що зберігають основні структурні характеристики вихідних молекул. Зокрема, для оцінки ліпофільності були застосовані N-бензоїльні похідні 63 первинних (клас 4) та 65 вторинних амінів (клас 5), а також 55 анілідів карбонових кислот (клас 6) (рис. 3). Такий підхід дозволив коректно визначити коефіцієнт розподілу октанол-вода, зберігаючи при цьому характерні структурні та електронні особливості вихідних сполук.

Рис. 2. Розподіл кількості молекул за типом із розрахованим pK_a Рис. 3. Розподіл кількості молекул за типом із розрахованим $\log P$

Датасет охоплює широкий спектр структурних особливостей, що створює підґрунтя для систематичного аналізу впливу різних факторів на фізико-хімічні властивості сполук. До його складу включено моноциклічні системи – від тричленних до семичленних циклоalkanів, – а також більш складні біциклічні структури, зокрема спіроциклічні, мостикові та конденсовані системи. Окрему групу становлять ациклічні похідні, що дає змогу оцінити внесок циклічності як структурного фактора.

Особливу увагу приділено різноманіттю фторованих замісників (рис. 4), зокрема монофтору (CHF), монофторметилу (CH_2F), дифторметилу (CHF_2), трифторметилу (CF_3) та gem-дифтору (CF_2).

Така варіативність забезпечує можливість детального простеження впливу кількості атомів фтору та їх просторового розташування на властивості молекули (рис. 5).

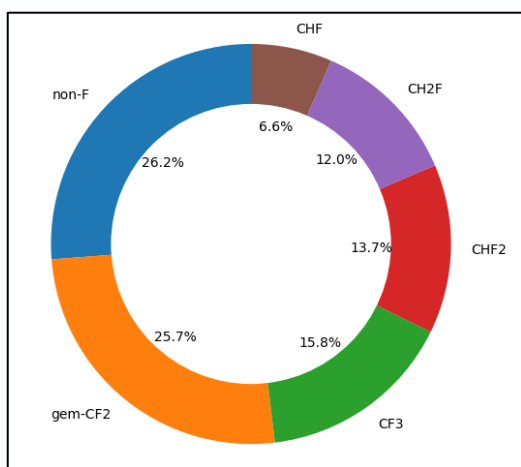
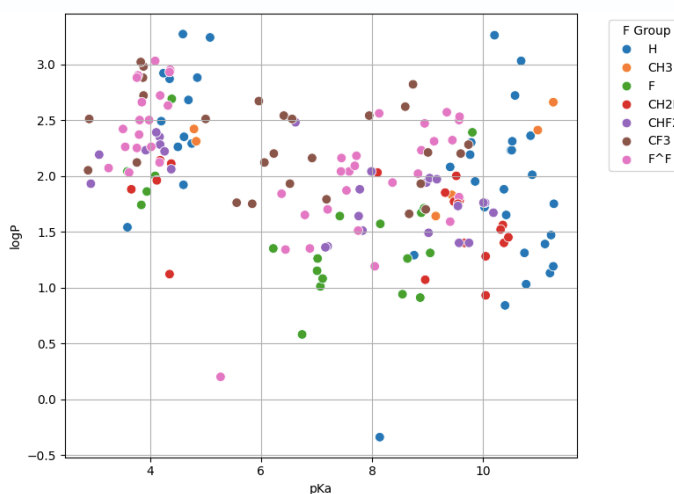


Рис. 4. Структурний розподіл молекул за фтором

Рис. 5. Розподіл $\log P$ та pK_a для різних F груп

У роботі [2] для забезпечення уніфікації та зручності навігації у наборі даних була розроблена спеціалізована система нумерації. Кожна сполука позначалася комбінацією символів, що відображають тип функціональної групи, будову скафолду та характер фторованого замісника. Додатково застосовувалися префікси, які вказують на стереохімічні особливості та положення замісника відносно функціональної групи [2].

Аналіз розподілу цільових змінних дав змогу виявити деякі характерні закономірності (рис. 6). Зокрема, для pK_a спостерігається виражений бімодальний розподіл, що відображає фундаментальні відмінності між кислотами та основами. Значення pK_a для амінів зосереджені переважно в діапазоні (9; 11,5), що відповідає очікуваним властивостям насичених амінів. Карбонові кислоти, навпаки, характеризуються значно нижчими значеннями pK_a – у межах (3,5; 5,0), що узгоджується з їхньою вираженою кислотною природою (рис. 7).

Розподіл значень $\log P$ виявився більш рівномірним і охоплює інтервал приблизно від 0.5 до 4 логарифмічних одиниць. Важливо підкреслити, що як у навчальній, так і в тестовій вибірках зберігається збалансована репрезентація всіх класів сполук і різних типів фторованих замісників (рис. 8). Це забезпечує можливість навчальним моделям коректно розпізнавати вплив структурних чинників на цільові властивості та сприяє підвищенню узагальнювальної здатності прогнозних алгоритмів.

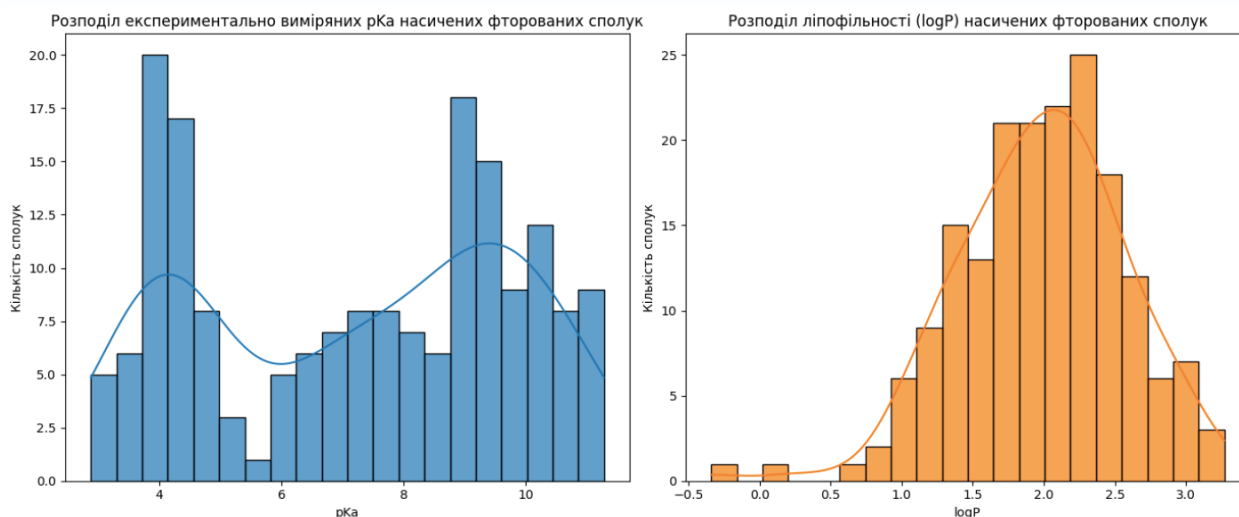


Рис. 6. Загальний розподіл цільових змінних

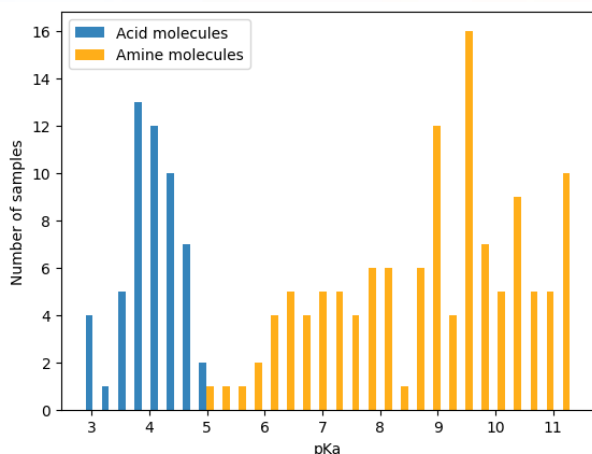


Рис. 7. Розподіл значення рКа для кислот і амінів

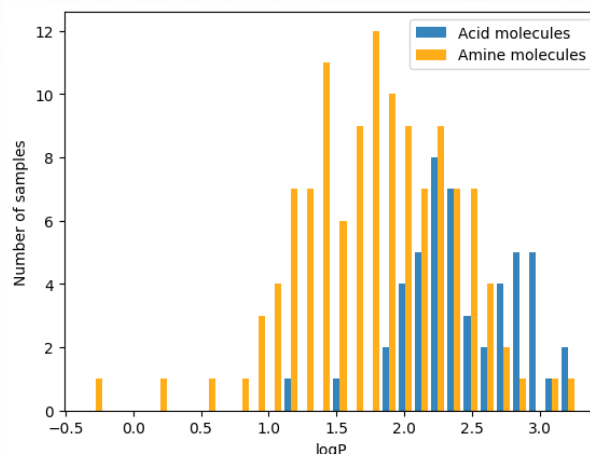


Рис. 8. Розподіл значення LogP для кислот і амінів

Для перевірки наявності аномальних викидів у значеннях цільових ознак побудованого набору даних (рис. 9) використано комплекс статистичних методів. Оскільки аномальні значення можуть суттєво впливати на якість моделей машинного навчання, їхнє виявлення та усунення є важливою складовою попередньої обробки. Спочатку за допомогою тесту Шапіро-Вілка визначався характер розподілу кожної ознаки. Для ознак із близьким до нормального розподілом застосовувався критерій z-score, тоді як для ознак, розподіл яких відхилявся від нормального, використовувався метод інтерквартильного розмаху. У результаті цього аналізу було вилучено чотирнадцять викидів для задачі прогнозування рКа та десять – для задачі прогнозування logP.

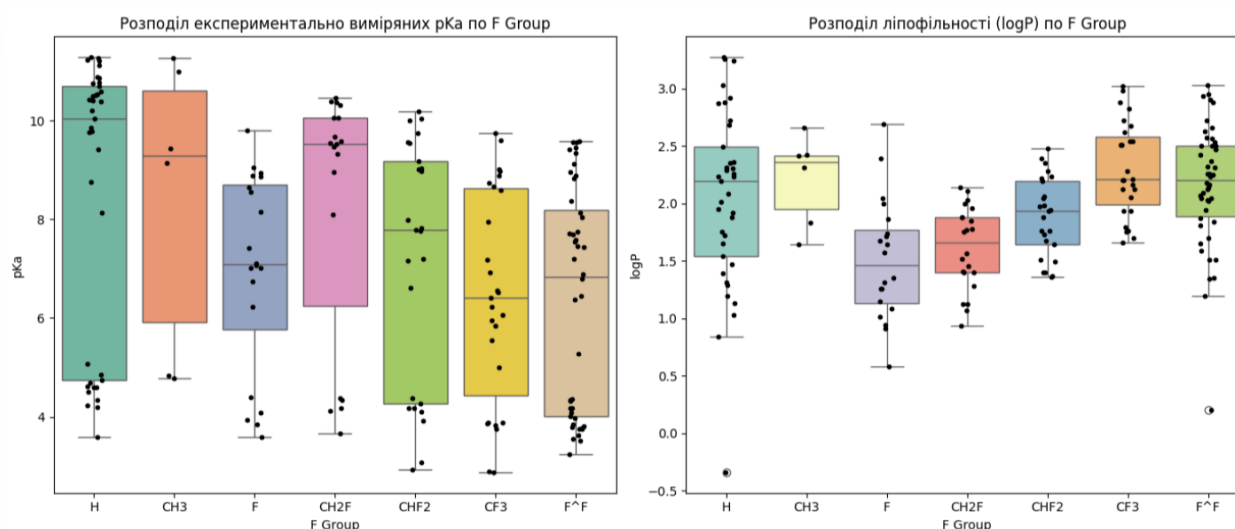


Рис. 9.1. Коробкові діаграми розподілу значень рКа та logP у вихідному наборі даних для різних груп та класів

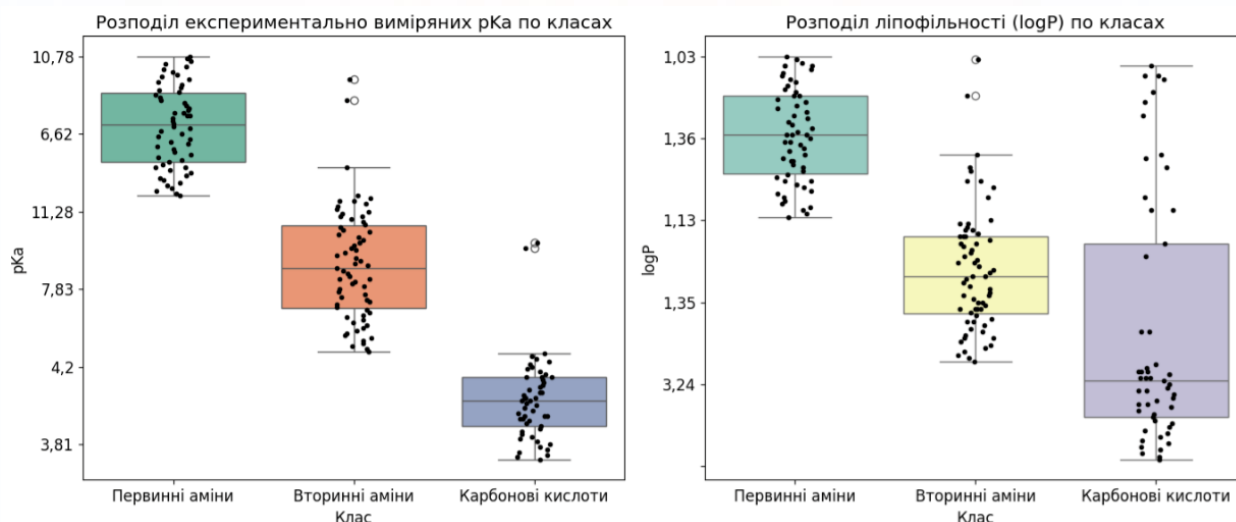


Рис. 9.2. Коробкові діаграми розподілу значень рКа та logP у вихідному наборі даних для різних груп та класів

Попередній аналіз експериментальних даних виявив певні закономірності, що підтверджують якість датасету та узгоджуються з хімічною інтуїцією. Для вторинних амінів спостерігається систематичне зменшення рКа зі збільшенням числа атомів фтору та їх наближенням до основного центру (рис. 10).

Зокрема, для α -положення кожен атом фтору знижує рКа приблизно на 1,7 одиниці; для β -положення цей ефект зменшується до $\sim 0,9$, а для γ -положення становить лише $\sim 0,54$. Подібні, хоча й дещо менш виражені тренди спостерігаються для первинних амінів.

У випадку карбонових кислот ситуація ускладнюється тим, що фторований замісник розташований на одну позицію далі від центру депротонування порівняно з амінами.

Спостережувані зміни рКа менші, а деякі закономірності менш очевидні, що може бути пов'язано з меншим розміром відповідного підмножини даних та складнішими взаємодіями факторів.

Тим не менш, загальна тенденція зниження кислотності при віддаленні фторованого замісника зберігається.

Для ліпофільності закономірності виявилися складнішими та менш передбачуваними. Загальний тренд демонструє зростання logP зі збільшенням кількості атомів фтору, причому CF_3 -група чинить найбільший вплив, значно перевищуючи ефект CHF_2 та CH_2F -груп (рис. 11). Водночас вплив інших факторів, таких як розмір циклу, положення замісника та стереохімія, виявився більш складним і нелінійним, що підкреслює багатофакторну природу ліпофільності та необхідність застосування складних моделей для її точного прогнозування.

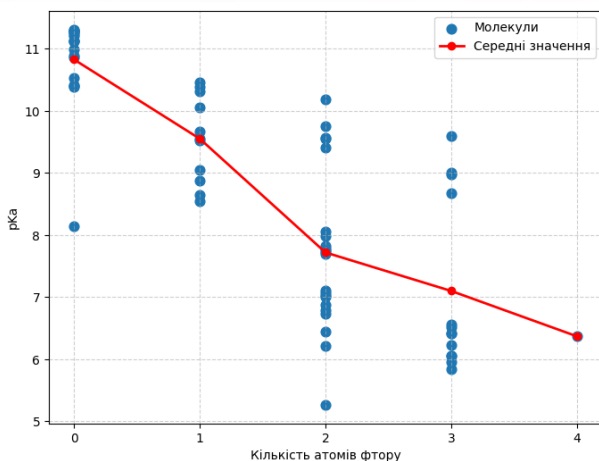


Рис. 10. Залежність pK_a від кількості атомів фтору у вторинних амінах

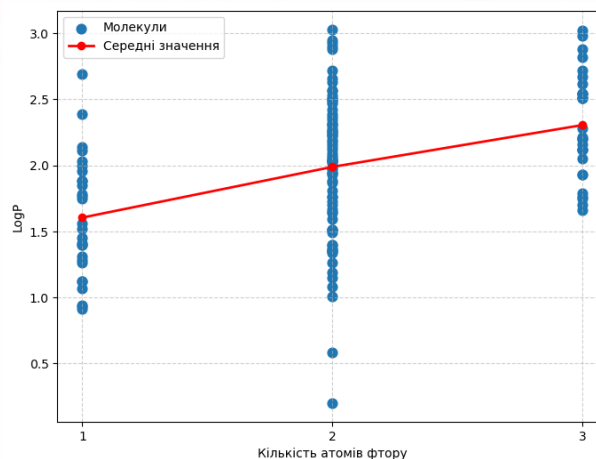


Рис. 11. Залежність LogP від кількості атомів фтору

В подальшому, для забезпечення коректного навчання моделі датасет було розділено на 80 % тренувальної та 20 % тестової підмножини за принципом стратифікованого розподілу. Щоб запобігти потраплянню структурно подібних молекул у різні підмножини, проводилася перевірка за коефіцієнтом схожості Танімото ($\geq 90\%$) [16]. Молекули, що перевищували цей поріг подібності, об'єднувалися в одну групу з одночасним збереженням пропорцій цільових змінних у підмножинах.

Завдяки застосованому підходу до поділу датасету та контролю структурної подібності молекул у роботі [2] було розроблено моделі на основі графових нейронних мереж, що демонструють високу точність прогнозування та відтворюваність результатів.

Висновки. Проведений комплексний аналіз спеціалізованого набору даних фторованих органічних сполук підтвердив його високу структурну та хімічну різноманітність, що забезпечує адекватне відображення впливу фторованих замісників на кислотно-основні властивості та ліпофільність молекул.

Виявлені закономірності, зокрема залежність pK_a від числа і положення атомів фтору та нелінійний характер зміни logP , підкреслюють складність структурно-фізико-хімічних взаємодій у цих системах. Ретельна обробка даних, включаючи видалення аномальних значень і контроль структурної подібності між навчальною та тестовою вибірками, дозволила знизити ризик витоку інформації і забезпечити коректне навчання моделей. Використання графових нейронних мереж на підставі цього набору продемонструвало високу точність прогнозування і відтворюваність результатів, підтверджуючи придатність датасету для подальшого розвитку високоточних прогнозних моделей у сфері фторорганічної хімії.

Література:

1. Benaiges, D., Pedro-Botet, J., & Climent, E. (2021). Hydrophilic or lipophilic statins? *Frontiers in Cardiovascular Medicine*. <https://doi.org/10.3389/fcvm.2021.687585>
2. Gurbych, O., Pavliuk, P., Krasnienkov, D., Liashuk, O., Melnykov, K., Grygorenko, O. (2025). Filling the gap in LogP and pKa evaluation for saturated fluorine-containing derivatives with machine learning. *Journal of Computational Chemistry*, 46(2). <https://doi.org/10.1002/jcc.70002>
3. Moroz, B., Melnykov, K. P., Holovach, S., Filatov, A. A., Raievskiy, O., Platonov, M., Liashuk, O., Volochnyuk, D. M., & Grygorenko, O. O. (2023). 6,6-Difluorobicyclo[3.1.0]hexane as a rigidified 4,4-difluorocyclohexane mimetic: Multi-gram synthesis, physicochemical characterization, and incorporation into maraviroc analogs. *Journal of Fluorine Chemistry*, 272, 110215. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2023.110215>
4. Smyrnov, O., Melnykov, K., Semeno, V., Liashuk, O., & Grygorenko, O. (2024). α -CF₃-substituted saturated bicyclic amines: Advanced building blocks for medicinal chemistry. *European Journal of Organic Chemistry*, 27(1), e202300935. DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.202300935>
5. Kihakh, S., Melnykov, V., Bilenko, K. P., Trofymchuk, S., Liashuk, O., & Grygorenko, O. O. (2024). gem-Difluoro-3-azabicyclo[3.n.1]alkanes and their derivatives – bicyclic fluorinated piperidine isosteres for drug discovery. *European Journal of Organic Chemistry*, 27(2), e202300937. DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.202300937>
6. Melnykov, K., Nazar, K., Smyrnov, O., Skreminskiy, A., Pavlenko, S., Klymenko-Ulianov, O., Shishkina, S., Volochnyuk, D., & Grygorenko, O. (2023). Mono- and difluorinated saturated heterocyclic amines for drug discovery: Systematic study of their physicochemical properties. *Chemistry – A European Journal*, 29, e202301383. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202301383>
7. Demchuk, O., & Grygorenko, O. (2023). The synthesis and acid-base properties of (fluoromethyl)- and (difluoromethyl)-substituted cyclobutane building blocks. *Journal of Organic and Pharmaceutical Chemistry*, 21(2), 3–9. DOI: <https://doi.org/10.24959/ophcj.23.274017>
8. Demchuk, O., Bobovskyi, B., Vashchenko, B., Hryshchuk, O., Skreminskiy, A., Chernykh, A., Moskvina, V., Hordiyenko, O., Volochnyuk, D., & Grygorenko, O. (2023). 3-Fluoroalkyl (CF₃, CHF₂, CH₂F) cyclobutane-derived building blocks for medicinal chemistry: Synthesis and physicochemical properties. *European Journal of Organic Chemistry*, 26(24), e202300292. DOI: <https://doi.org/10.24959/ophcj.23.274017>
9. Melnykov, K., Tavlui, O., Skreminskiy, A., Kuchkovska, Y., & Grygorenko, O. (2022). Impact of fluoroalkyl substituents on the physicochemical properties of saturated heterocyclic amines. *European Journal of Organic Chemistry*, 28(55), e202201601. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202201601>
10. Holovach, S., Melnykov, K., Skreminskiy, A., Herasymchuk, M., Tavlui, O., Alosyn, D., Borysko, P., Rozhenko, A., Ryabukhin, S., Volochnyuk, D., & Grygorenko, O. (2022). Effect of gem-difluorination on the key physicochemical properties relevant to medicinal chemistry: The case of functionalized cycloalkanes. *Chemistry – A European Journal*, 28(19), e202200331. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202200331>
11. Malashchuk, A., Chernykh, A., Dobrydnev, A., & Grygorenko, O. (2021). Fluorine-labelled spiro[3.3]heptane-derived building blocks: Is single fluorine the best? *European Journal of Organic Chemistry*, 2021(35), 4897–4910. DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.202100804>
12. Homon, A., Hryshchuk, O., Mykhailenko, O., Vashchenko, B., Melnykov, K., Michurin, O., Daniliuc, C., Gerus, I., Kovtunencko, V., Kondratov, I., & Grygorenko, O. (2021). 4-(Di-/trifluoromethyl)-2-heterabicyclo[2.1.1]hexanes: Advanced fluorinated phenyl isosteres and proline

analogues. *European Journal of Organic Chemistry*, 2021(47), 6580–6590. DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.202100414>

13. GitHub repository: Blackthorn AI. (2023). *fluoricLogPpKa: Dataset of pKa and logP values for fluorinated organic compounds* [CSV file]. GitHub. https://github.com/blackthorn-ai/fluoricLogPpKa/blob/a470b947959136594b88c6b10ce9c920f991006b/fluoriclogppka/data/IDs_SMILES_importances_pKa_logP.csv

14. Шевчук О.Ф., Павлюк П.П., Козловський А.В., Паночишин Ю.М., Сімончук С.В. Інформаційна технологія оцінювання *LogP* та *pKa* фторвмісних насичених похідних на основі моделей машинного навчання. *Наука і техніка сьогодні*. 2025. № 11 (52). С. 2917–2927.

15. FluoricLogPpKa. (2025). [Online]. Retrieved from <http://fluoriclogppka.com>

16. Tanimoto, T. T. (1958). *An elementary mathematical theory of classification and prediction*. IBM Research Report.

References:

1. Benaiges, D., Pedro-Botet, J., & Climent, E. (2021). Hydrophilic or lipophilic statins? *Frontiers in Cardiovascular Medicine*. <https://doi.org/10.3389/fcvm.2021.687585>

2. Gurbych, O., Pavliuk, P., Krasnienkov, D., Liashuk, O., Melnykov, K., Grygorenko, O. (2025). Filling the gap in LogP and pKa evaluation for saturated fluorine-containing derivatives with machine learning. *Journal of Computational Chemistry*, 46(2). <https://doi.org/10.1002/jcc.70002>

3. Moroz, B., Melnykov, K. P., Holovach, S., Filatov, A. A., Raievskiy, O., Platonov, M., Liashuk, O., Volochnyuk, D. M., & Grygorenko, O. O. (2023). 6,6-Difluorobicyclo[3.1.0]hexane as a rigidified 4,4-difluorocyclohexane mimetic: Multi-gram synthesis, physicochemical characterization, and incorporation into maraviroc analogs. *Journal of Fluorine Chemistry*, 272, 110215. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2023.110215>

4. Smyrnov, O., Melnykov, K., Semeno, V., Liashuk, O., & Grygorenko, O. (2024). α -CF₃-substituted saturated bicyclic amines: Advanced building blocks for medicinal chemistry. *European Journal of Organic Chemistry*, 27(1), e202300935. DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.202300935>

5. Kihakh, S., Melnykov, V., Bilenko, K. P., Trofymchuk, S., Liashuk, O., & Grygorenko, O. O. (2024). gem-Difluoro-3-azabicyclo[3.n.1]alkanes and their derivatives – bicyclic fluorinated piperidine isosteres for drug discovery. *European Journal of Organic Chemistry*, 27(2), e202300937. DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.202300937>

6. Melnykov, K., Nazar, K., Smyrnov, O., Skreminskyi, A., Pavlenko, S., Klymenko-Ulianov, O., Shishkina, S., Volochnyuk, D., & Grygorenko, O. (2023). Mono- and difluorinated saturated heterocyclic amines for drug discovery: Systematic study of their physicochemical properties. *Chemistry – A European Journal*, 29, e202301383. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202301383>

7. Demchuk, O., & Grygorenko, O. (2023). The synthesis and acid-base properties of (fluoromethyl)- and (difluoromethyl)-substituted cyclobutane building blocks. *Journal of Organic and Pharmaceutical Chemistry*, 21(2), 3–9. DOI: <https://doi.org/10.24959/ophcj.23.274017>

8. Demchuk, O., Bobovskyi, B., Vashchenko, B., Hryshchuk, O., Skreminskyi, A., Chernykh, A., Moskvina, V., Hordiyenko, O., Volochnyuk, D., & Grygorenko, O. (2023). 3-Fluoroalkyl (CF₃, CHF₂, CH₂F) cyclobutane-derived building blocks for medicinal chemistry: Synthesis and physicochemical properties. *European Journal of Organic Chemistry*, 26(24), e202300292. DOI: <https://doi.org/10.24959/ophcj.23.274017>

9. Melnykov, K., Tavlui, O., Skreminskiy, A., Kuchkovska, Y., & Grygorenko, O. (2022). Impact of fluoroalkyl substituents on the physicochemical properties of saturated heterocyclic amines. *European Journal of Organic Chemistry*, 28(55), e202201601. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202201601>
10. Holovach, S., Melnykov, K., Skreminskiy, A., Herasymchuk, M., Tavlui, O., Aloslyn, D., Borysko, P., Rozhenko, A., Ryabukhin, S., Volochnyuk, D., & Grygorenko, O. (2022). Effect of gem-difluorination on the key physicochemical properties relevant to medicinal chemistry: The case of functionalized cycloalkanes. *Chemistry – A European Journal*, 28(19), e202200331. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202200331>
11. Malashchuk, A., Chernykh, A., Dobrydnev, A., & Grygorenko, O. (2021). Fluorine-labelled spiro[3.3]heptane-derived building blocks: Is single fluorine the best? *European Journal of Organic Chemistry*, 2021(35), 4897–4910. DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.202100804>
12. Homon, A., Hryshchuk, O., Mykhailenko, O., Vashchenko, B., Melnykov, K., Michurin, O., Daniliuc, C., Gerus, I., Kovtunencko, V., Kondratov, I., & Grygorenko, O. (2021). 4-(Di-/trifluoromethyl)-2-heterabicyclo[2.1.1]hexanes: Advanced fluorinated phenyl isosteres and proline analogues. *European Journal of Organic Chemistry*, 2021(47), 6580–6590. DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.202100414>
13. GitHub repository: Blackthorn AI. (2023). *fluoricLogPpKa: Dataset of pKa and logP values for fluorinated organic compounds* [CSV file]. GitHub. https://github.com/blackthorn-ai/fluoricLogPpKa/blob/a470b947959136594b88c6b10ce9c920f991006b/fluoriclogppka/data/IDs_SMILES_importances_pKa_logP.csv
14. Shevchuk, O.F., Pavliuk, P.P., Kozlovskyi, A.V., Panochyshyn, Yu.M., Simonchuk, S.V. (2025). Informatsiina tekhnolohiia otsiniuvannia LogP ta pKa ftovmisnykh nasychenykh pokhidnykh na osnovi modelei mashynnoho navchannia [Information technology for evaluating LogP and pKa of fluorine-containing saturated derivatives based on machine learning models]. *Nauka i tekhnika sohodni – Science and Technology Today*, 11(52), 2917–2927. [in Ukrainian].
15. FluoricLogPpKa. (2025). [Online]. Retrieved from <http://fluoriclogppka.com>
16. Tanimoto, T. T. (1958). *An elementary mathematical theory of classification and prediction*. IBM Research Report.