

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U002795

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-07-2025

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ ХНУ імені В. Н. Каразіна № 0302-Зк/1346 від 12.09.2025 р.



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Демидов Олексій Олегович

2. Oleksii Demydov

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-4657-6884

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: Сучасні напрямки розвитку фундаментальної хімії та їх прикладна перспектива

Дата захисту: 26-08-2025

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 9421

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.15, 31.21, 31.21.25, 31.21.25.09

Тема дисертації:

1. Синтез та дослідження протолітичних рівноваг похідних 4п-гідроксифлавонолу
2. Synthesis and study of proteolytic equilibria of 4p-hydroxyflavone derivatives

Реферат:

1. Флавоноли є важливим класом природних біоактивних сполук, які завдяки своїм спектральним властивостям та здатністю до комплексоутворення знаходять широке застосування як флуоресцентні зонди для дослідження біологічних систем та хімічного аналізу. Дисертаційна робота присвячена модифікації методів синтезу похідних 4п гідроксифлавонолу, аналізу структури цих сполук, дослідженню їх кислотно основних властивостей в неводному середовищі, вивченню їх впливу на перенос іонів металів в двохфазних середовищах та аналізу зв'язування з білковими молекулами. У роботі оптимізовано синтетичні підходи до одержання серії флавонолів з різними замісниками у боковому бензеновому кільці. Одержані продукти охарактеризовані методами спектроскопії ядерного магнітного резонансу (^1H та ^{13}C ЯМР), мас-спектрометрії та рентгеноструктурного аналізу. Особлива увага приділена вивченню протолітичних рівноваг похідних 4п гідроксифлавонолу у основному та збудженому станах із використанням методів спектрофотометрії, флуоресцентного аналізу. Шляхом молекулярного докінгу і флуоресцентного титрування дослідження зв'язування 4п-гідроксифлавонолів з молекулами білка – п-глюкозидази. Оцінено вплив комплексоутворення

4п-гідроксифлавонолів з іонами металів d-елементів на перенос цих іонів шляхом екстракції в системах октанол – вода і вода – водний розчин полімеру. Результати отримані в дисертаційній роботі розширюють уявлення про вплив замісників на спектрально-флуоресцентні властивості похідних 4п гідроксифлавонолу, на рівноваги між протолітичними формами досліджуваних сполук, їх комплексоутворення і зв'язування з молекулами білків, а також демонструють перспективи використання цих сполук у створенні флуоресцентних сенсорів для аналітичних і біохімічних досліджень.

2. Flavonols are an important class of natural bioactive compounds that, due to their spectral properties and ability to form complexes, are widely used as fluorescent probes in the study of biological systems and in chemical analysis. This dissertation focuses on the modification of synthetic methods for producing 4p-hydroxyflavonol derivatives, structural analysis of these compounds, investigation of their acid-base behavior in non-aqueous media, examination of their influence on metal ion transport in two-phase systems, and analysis of their binding to protein molecules. The work includes the optimization of synthetic approaches to obtain a series of flavonols with various substituents on the lateral benzene ring. The synthesized compounds were characterized using nuclear magnetic resonance spectroscopy (¹H and ¹³C NMR), mass spectrometry, and X-ray crystallography. Special attention was given to the study of protolytic equilibria of 4p hydroxyflavonol derivatives in both ground and excited states using spectrophotometry and fluorescence spectroscopy. Molecular docking and fluorescence titration were used to investigate the binding of 4p-hydroxyflavonols to the protein α -glucosidase. The impact of complexation between 4p-hydroxyflavonols and d-metal ions on the transport of these ions was assessed in octanol–water and water–aqueous polymer two-phase systems. The results of this dissertation contribute to a deeper understanding of how substituents influence the spectral and fluorescence properties of 4p-hydroxyflavonol derivatives, their protolytic equilibria, complexation behavior, and binding to proteins. These findings also highlight the potential of these compounds for use in the development of fluorescent sensors for analytical and biochemical applications.

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: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Demidov O. O., Gladkov E. S., Kyrychenko A. V., Roshal A. D. Synthetic and natural flavonols as promising fluorescence probes for α -glucosidase activity screening. *Functional Materials*. 2022. Vol. 29, No. 2. P. 252–262. DOI: <https://doi.org/10.15407/fm29.02.252> (Scopus, Web of Science, Q4)
- Chepeleva L. V., Demidov O. O., Snizhko A. D., Tarasenko D. O., Chumak A. Y., Kolomoitsev O. O., Kotliar V. M., Gladkov E. S., Kyrychenko A. V., Roshal A. D. Binding interactions of hydrophobically-modified flavonols with α -glucosidase: fluorescence spectroscopy and molecular modelling study. *RSC Advances*. 2023. Vol. 13, P. 34107–34121. DOI: <https://doi.org/10.1039/D3RA06276G> (Scopus, Web of Science, Q2)
- Chepeleva L. V., Tarasenko D. O., Chumak A. Y., Demidov O. O., Snizhko A. D., Kolomoitsev O. O., Kotliar V. M., Gladkov E. S., Tatarets A. L., Kyrychenko A. V., Roshal A. D. 4p-Benzyloxyflavonol glucoside as fluorescent indicator for α -glucosidase activity. *Functional Materials*. 2023. Vol. 30, No. 4. P. 494–505. DOI: <https://doi.org/10.15407/fm30.04.494> (Scopus, Web of Science, Q4)
- Demidov O. O., Krasnopyorova A. V., Yukhno G. D., Efimova N. V., Roshal A. D. Flavonol assisted extraction of divalent and trivalent metal ions. *Functional Materials*. 2024. Vol. 31, No. 4. P. 601–608. DOI: <https://doi.org/10.15407/fm31.04.601> (Scopus, Web of Science, Q4)

- Demidov O. O., Roshal A. D. Methods of Protection/Deprotection of Hydroxy Groups in the Synthesis of Polyhydroxy Flavonols. Kharkiv University Bulletin. Chemical Series. 2024. No. 43. P. 48–55. DOI: <https://doi.org/10.26565/2220-637X-2024-43-04>

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

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту; поліпшення стану навколишнього середовища; поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0122U001387, 0124U005059

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рошаль Олександр Давидович
2. Alexander Roshal

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1537-9044

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Войтенко Зоя Всеволодівна
2. Voitenko Zoia V.

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:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Халавка Юрій Богданович

2. Yuriy Khalavka

Кваліфікація: д. х. н., доц., 02.00.21

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-6832-447X

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Код за ЄДРПОУ: 02071240

Місцезнаходження: вул. Коцюбинського, буд. 2, Чернівці, 58012, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Водозазька Наталія Олександрівна

2. Natalya Vodolazkaya

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9718-5384

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Колос Надія Миколаївна

2. Nadiya Kolos

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7520-656X

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

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

Коробов Олександр Ісаакович

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

Коробов Олександр Ісаакович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Шевченко Андрій Олександрович

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна