

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U002868

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-07-2025

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ Установи від 26.09.2025 р. № 129



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. СВОЯКОВ Ростислав Петрович

2. Svoiakov Rostyslav P.

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: Хімія

Дата захисту: 29-08-2025

Спеціальність за освітою: Хімічні технології палива та вуглецевих матеріалів

Місце роботи здобувача: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61072, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 10423

Повне найменування юридичної особи: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61072, 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: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61072, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.15, 31.21

Тема дисертації:

1. Синтез та дослідження сквараїнових барвників та супрамолекулярних систем на їхній основі
2. Synthesis and study of squaraine dyes and supramolecular systems based on them

Реферат:

1. Свояков Р.П. Синтез та дослідження сквараїнових барвників та супрамолекулярних систем на їхній основі. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 102 Хімія. – Державна наукова установа «Науково-технологічний комплекс «Інститут монокристалів» Національної академії наук України», Харків, 2025. Флуоресцентні методи аналізу належать до числа найбільш високочутливих, селективних та надійних інструментів сучасної науки. Завдяки своїй простоті, швидкості, екологічності та можливості застосування в реальному часі, вони широко використовуються в біомедичних дослідженнях, клінічній діагностиці, хімічному аналізі, екологічному моніторингу, контролі якості продукції, оптоелектроніці та нанотехнологіях. Серед різноманіття флуоресцентних барвників особливу увагу привертають сквараїнові сполуки – хромофори з вузькими інтенсивними смугами поглинання та флуоресценції, високими квантовими виходами та здатністю

функціонувати у біологічно прозорому вікні (650–900 нм). Завдяки цим властивостям сквараїни ефективно застосовуються в оптичній візуалізації, сенсорних технологіях, фотодинамічній терапії, розробці світлозбиральних систем та квантових пристроїв. Попри привабливі оптичні характеристики, сквараїнові барвники мають певні обмеження, зокрема низьку фотостабільність, схильність до агрегації у водних середовищах і високу чутливість до нуклеофільних агентів. Для подолання цих проблем актуальним є створення супрамолекулярних систем — зокрема, ротаксанів, де барвник інкапсулюється макроциклом, що захищає хромофор та покращує його спектральні властивості. Одночасно з цим все більше дослідницької уваги привертають гемісквараїнові барвники — короткохвильові флуорофори з асиметричною структурою, які демонструють чутливість до параметрів мікрооточення та здатність до специфічної взаємодії з біомолекулами і йонами металів. Метою даної роботи є синтез нових сквараїнових та гемісквараїнових барвників, а також створення на їх основі стабільних супрамолекулярних систем — ротаксанів, із подальшим вивченням спектрально-люмінесцентних і хемосенсорних властивостей отриманих сполук. Проведено оптимізацію синтетичних методик для одержання гемісквараїнів із вторинними та третинними амінами, що демонструють різну чутливість до полярності, кислотності, в'язкості середовища та взаємодії з бичачим сироватковим альбуміном (БСА). Встановлено, що барвники MeH і PhH функціонують як pH-залежні зонди, а PhPh проявляє високу чутливість до зміни в'язкості середовища. У свою чергу, барвник PhMe демонструє суттєве зростання флуоресценції в присутності білків, що свідчить про його перспективність як біосенсора. Особливу увагу приділено гемісквараїнам HSq1 та HSq2 із дитіокарбамоїльними фрагментами, які виявляють високу селективність до катіонів ртуті(II) та утворюють стабільні флуоресцентні комплекси 1:1. Визначено константи зв'язування, що складають $3.8 \times 10^6 \text{ M}^{-1}$ для HSq1–Hg та $1.28 \times 10^6 \text{ M}^{-1}$ для HSq2–Hg, та межі виявлення — 40 нМ і 52 нМ відповідно. Також досліджено тіонований барвник SqS, який проявляє металохромні властивості у присутності Hg²⁺ — із зміною кольору розчину, зміною поглинання та формуванням комплексів зі стехіометрією 1:1 і 2:1. Ці результати демонструють потенціал одержаних сполук як флуоресцентних сенсорів для виявлення важких металів у біологічних і водних зразках. У дисертації вперше синтезовано та охарактеризовано сквараїн-ротаксани SR1-COOH – SR3 COOH, які продемонстрували покращені спектральні властивості порівняно з вихідними барвниками. Довгохвильові сквараїн-ротаксани були ковалентно приєднані до олігонуклеотидів для формування структур Холлідея — жорстких чотириланцюгових ДНК комплексів, які забезпечують фіксацію барвників у просторі. Це дозволило дослідити процеси контрольованої агрегації й встановити утворення димерів із рідкісним косим пакуванням, характерним для нанофотонних застосувань. Виявлено симетричне екситонне розщеплення смуг поглинання — спектральну ознаку такої впорядкованої самоорганізації. Додатково показано, що фторовані макроцикли в ротаксанах сприяють більш щільному пакуванню хромофорів і посиленню екситонної взаємодії. Практична цінність роботи полягає у встановленні залежностей між структурою барвників (зокрема типом аміногруп та замісниками) та їхніми флуоресцентними й сенсорними властивостями. Визначено перспективні зонди для визначення полярності, кислотності та в'язкості середовища, а також для детекції іонів ртуті(II) та білків. Синтезовані супрамолекулярні системи сквараїн-ротаксанового типу відкривають можливості створення стабільних функціональних матеріалів, придатних для використання в нанофотоніці, біосенсоріці, енергетичних системах та квантових технологіях.

2. Svoiakov R.P. Synthesis and study of squaraine dyes and supramolecular systems based on them. – Qualification scientific work presented as a manuscript. Dissertation for the degree of Doctor of Philosophy in specialty 102 – Chemistry. State Scientific Institution «Institute for Single Crystals» of National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv, 2025. Fluorescence-based analytical methods are among the most sensitive, selective, and reliable tools in modern science. Due to their simplicity, speed, environmental friendliness, and real-time applicability, they are widely used in biomedical research, clinical diagnostics, chemical analysis, environmental monitoring, quality control, optoelectronics, and nanotechnology. Among the wide variety of fluorescent dyes, squaraine compounds attract particular attention — these are chromophores characterized by narrow and intense absorption and emission bands, high quantum yields, and the ability to function within the biologically transparent window (650–900 nm). These properties make squaraines highly effective for optical imaging, sensor technologies,

photodynamic therapy, light-harvesting systems, and quantum devices. Despite their attractive optical properties, squaraine dyes have certain limitations, including low photostability, a tendency to aggregate in aqueous media, and high sensitivity to nucleophilic agents. To address these issues, the development of supramolecular systems – particularly rotaxanes, where the dye is encapsulated by a macrocycle that protects the chromophore and improves its spectral properties – is highly relevant. At the same time, increasing research interest is directed toward hemisquaraine dyes – short-wavelength fluorophores with an asymmetric structure that exhibit sensitivity to microenvironmental parameters and can specifically interact with biomolecules and metal ions. The aim of this study is the synthesis of new squaraine and hemisquaraine dyes, as well as the development of stable supramolecular systems – rotaxanes – based on them, followed by the investigation of the spectral-luminescent and chemosensory properties of the resulting compounds. Synthetic methods for obtaining hemisquaraines with secondary and tertiary amines have been optimized, with the resulting dyes showing varying sensitivity to polarity, acidity, viscosity of the medium, and interaction with bovine serum albumin (BSA). It has been established that dyes MeH and PhH function as pH-sensitive probes, while PhPh shows high sensitivity to changes in medium viscosity. The dye PhMe, in turn, exhibits a significant increase in fluorescence in the presence of proteins, indicating its potential as a biosensor. Special attention has been given to hemisquaraines HSq1 and HSq2 with dithiocarbamoyl fragments, which demonstrate high selectivity toward mercury(II) cations and form stable 1:1 fluorescent complexes. Binding constants of $3.8 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$ for HSq1-Hg and $1.28 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$ for HSq2-Hg have been determined, along with detection limits of 40 nM and 52 nM, respectively. Additionally, the thionated dye SqS was investigated, showing metalochromic properties in the presence of Hg²⁺ – with changes in solution color, absorption spectra, and formation of complexes with 1:1 and 2:1 stoichiometry. These results highlight the potential of the obtained compounds as fluorescent sensors for detecting heavy metals in biological and aqueous samples. The dissertation presents, for the first time, the synthesis and characterization of squaraine rotaxanes SR1-COOH to SR3-COOH, which exhibit improved spectral properties compared to their parent dyes. Long-wavelength squaraine rotaxanes were covalently attached to oligonucleotides to form Holliday structures – rigid four-stranded DNA complexes that fix the dyes spatially. This enabled the study of controlled aggregation processes and revealed the formation of dimers with rare oblique packing, characteristic of nanophotonic applications. Symmetrical excitonic splitting of absorption bands – a spectral signature of such ordered self-assembly – was observed. Additionally, it was shown that fluorinated macrocycles in the rotaxanes promote tighter chromophore packing and enhanced excitonic interactions. The practical significance of this work lies in establishing correlations between dye structure (particularly the type of amine groups and substituents) and their fluorescence and sensory properties. Promising probes have been identified for determining polarity, acidity, and viscosity of the medium, as well as for detecting mercury(II) ions and proteins. The synthesized supramolecular squaraine-rotaxane systems open up opportunities for creating stable functional materials suitable for use in nanophotonics, biosensing, energy systems, and quantum technologies.

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:

- Svoiakov, R. P.; Kulyk, O. G.; Hovor, I. V.; Vlasenko, H. S.; Tatarets, A. L.; Kolosova, O. S. Indolenine-based semisquaraine dye for visual detection and sensing of mercury(II). *Funct. Mater.* 2025, 32 (1), 126–133. <https://doi.org/10.15407/fm32.01.126>.

- Svoiakov, R. P.; Kulyk, O. G.; Hovor, I. V.; Shishkina, S. V.; Tatarets, A. L. Dyes and pigments environment-sensitive indolenine-based hemisquaraine dyes : Synthesis, molecular structure, and spectral properties. *Dyes Pigm.* 2023, 219, 111612. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2023.111612>.
- Barclay, M. S.; Wilson, C. K.; Roy, S. K.; Mass, O. A.; Obukhova, O. M.; Svoiakov, R. P.; Tatarets, A. L.; Chowdhury, A. U.; Huff, J. S.; Turner, D. B.; Davis, P. H.; Terpetschnig, E. A.; Yurke, B.; Knowlton, W. B.; Lee, J.; Pensack, R. D. Oblique packing and tunable excitonic coupling in DNA-templated squaraine rotaxane dimer aggregates. *ChemPhotoChem* 2022, 6 (7), e202200039. <https://doi.org/10.1002/cptc.202200039>.
- 4. Kobzev D. V., Kolosova O. S., Obukhova O. M., Semenova O. M., Svoyakov R. P., Tatarets A. L., Terpetschnig E. A. Luminescent squaraine rotaxane compounds. Patent US 11,091,646 B2 (Aug. 17, 2021). Основний внесок здобувача: синтез та спектральні дослідження сквараїн-ротаксанових систем.
- Свояков Р. П., Кулик О. Г., Колосова О. С., Татарець А. Л. Синтез та дослідження флуоресцентних сквараїнових барвників та супрамолекулярних систем на їхній основі // XX Наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2025». 2–4 червня 2025, Львів, Україна. – С. 22.
- Свояков Р. П., Колосова О. С., Кулик О. Г., Обухова О. М., Ермоленко І. Г., Татарець А. Л. Синтез флуоресцентних сквараїн-ротаксанових барвників та їхнє дослідження у ДНК-матрицях // XXVI Українська конференція з органічної та біоорганічної хімії. 16–20 вересня 2024, Ужгород, Україна. – С. 48.
- Kulyk O. G., Svoiakov R. P., Hovor I. V., Tatarets A. L. Environment-sensitive indolenine-based hemisquaraine dyes // 6th International Caparica Conference on Chromogenic and Emissive Materials (IC3EM). 7–11 July 2024, Caparica, Portugal. – P. 173.
- Свояков Р. П., Говор І. В., Татарець А. Л., Кулик О. Г. Синтез та дослідження чутливих до мікрооточення сенсорів на основі гемісквараїнових барвників // XVI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські читання – 2024» (ХКЧ'24). 30 квітня 2024, Харків, Україна. – С. 99.
- Кулик О. Г., Свояков Р. П., Вакслер Є. О., Татарець А. Л. Колориметричний сенсор на основі семісквараїнового барвника для детекції катіонів ртуті (II) // VIII Міжнародна науково-практична інтернет-конференція «Хімія, біотехнологія, екологія та освіта». 15–16 травня 2024, Полтава, Україна. – С. 142–147.
- Свояков Р. П., Колосова О. С., Татарець А. Л., Кулик О. Г. Хемосенсор на основі гемісквараїнового барвника для кількісного визначення іонів ртуті (II) // VII Міжнародної (XVII Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення» (ХПС-2024). 19–21 березня 2024, Вінниця, Україна. – С. 20.
- Свояков Р. П., Кулик О. Г., Говор І. В., Татарець А. Л. Чутливі до мікрооточення сенсори на основі гемісквараїнових барвників // XIV Всеукраїнської конференції молодих вчених, студентів та аспірантів з актуальних питань хімії. 10–12 жовтня 2023, Харків, Україна. – С. 13.
- Svoiakov R. P., Kulyk O. G., Hovor I. V., Tatarets A. L. Environment sensitive monosquaraine dyes // XIX Scientific Conference «Lviv Chemical Readings – 2023». 29–31 May 2023, Lviv, Ukraine. – P. 134.
- Свояков Р. П., Кулик О. Г., Вакслер Є. О., Говор І. В., Татарець А. Л. Колориметричні сенсори на основі сквараїнових барвників для кількісного визначення важких металів // X Міжнародна науково-практична конференція «Хімія, біо- і нанотехнології, екологія та економіка в харчовій та косметичній промисловості». 18–19 листопада 2022, Харків, Україна. – С. 70.
- Свояков Р. П., Кулик О. Г., Татарець А. Л. Семісквараїновий барвник як флуоресцентний хемосенсор для селективного визначення катіонів ртуті (II) // I Міжнародна науково-практична конференція «Актуальні проблеми хімії та хімічної технології». 30 листопада 2022, Київ, Україна. – С. 32.
- Svoiakov R. P., Kulyk O. G., Hovor I. V., Tatarets A. L. New colorimetric sensor based on squaraine dye for selective and sensitive detection of mercury ions // 5th International Caparica Conference on Chromogenic and Emissive Materials (IC3EM). 3–7 July 2022, Caparica, Portugal. – P. 251.
- Свояков Р. П., Колосова О. С., Татарець А. Л. Синтез та спектральні властивості нових чутливих до в'язкості сквараїнових барвників // XVIII Наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2021». 31 травня – 2 червня 2021, Львів, Україна. – С. 015.

- Svoiakov R. P., Khabuseva S. U., Kolosova O. K., Tatars A. L. Synthesis and spectral properties of novel viscosity-sensitive dyes // 4th International Caparica Conference on Chromogenic and Emissive Materials 2020, IC3EM. 16–19 November 2020, Caparica, Portugal. – P. 194.
- Svoiakov R. P., Khabuseva S. U., Tatars A. L. Synthesis of novel indoleninebased monosquaraine dyes sensitive to viscosity // 8th International Conference «Chemistry of Nitrogen Containing Heterocycles» in memoriam of Prof. Valeriy Orlov (CNCH-2018). 12–18 November 2018, Kharkiv, Ukraine. – P. 143.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0122U002386; 0121U108887; 0122U002200; 0124U004748

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. КУЛИК Олеся Геннадіївна

2. Kulyk Olesia H.

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61072, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Татарець Анатолій Леонідович

2. Anatoliy L. Tatars

Кваліфікація: к. х. н., с.д., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61072, 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. Чейпеш Тетяна Олександрівна
2. Tetiana O. Cheipesh

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

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

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 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. Кулініч Андрій Володимирович
2. Andrii V. Kulinich

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0857-6632

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Анан'єва Валерія Вікторівна

2. Valeriia V. Ananieva

Кваліфікація: к. т. н., доц., 05.18.06

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61072, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Брильова Катерина Юріївна

2. Kateryna Brylova

Кваліфікація: к. х. н., с.д., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8903-4922

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61072, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

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

Ліпсон Вікторія Вікторівна

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

Ліпсон Вікторія Вікторівна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Широбокова Марія Георгіївна

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна