

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0822U100600

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-02-2022

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кловак Вікторія Олегівна

2. Klovak Viktoriia Olehivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 25-01-2022

Спеціальність за освітою: 10 Природничі науки

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** ДФ 26.001.256

**Повне найменування юридичної особи:** Київський національний університет імені Тараса Шевченка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

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

**Повне найменування юридичної особи:** Київський національний університет імені Тараса Шевченка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.19

**Тема дисертації:**

1. Гідрофобно-модифіковані реагентні системи для флюоресцентного визначення органічних сполук іонної природи
2. Hydrophobically modified reagent systems for fluorescence determination of organic compounds of ionic nature

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена систематичному дослідженню та оцінці сумісного впливу заряду, природи та гідрофобності органічних реагентів і поверхнево-активних речовин на аналітичний сигнал останніх у розчинах, виявленню ефектів супрамолекулярної відповідності при асоціації реагентів з ПАР та розробці практичних рекомендацій по раціональному створенню ПАР модифікованих реагентних систем і методик флюоресцентного визначення гідрофобних органічних сполук іонної природи, зокрема білків. У роботі з'ясовано основні чинники впливу на аналітичний сигнал іонних ПАР у двокомпонентних асоціатах реагент – ПАР. Встановлено сумісний вплив параметрів гідрофобності компонентів асоціату, інтенсивності флюоресценції розчинів реагенту та контрастності реакції асоціації на аналітичний сигнал ПАР у розчинах. Показана різна природа утворених двокомпонентних систем у залежності від співвідношення зарядів

реагенту та ПАР. У результаті проведено розподіл досліджених асоціатів у залежності від здатності реагентів проявляти електростатичне притягання з протиіоном ПАР. Показано, що аніонні реагенти, які здійснюють електростатичний внесок в утворення систем реагент-ПАР, характеризуються більшою стійкістю асоціатів та дають більший аналітичний сигнал. Проведена оцінка електростатичних та гідрофобних внесків у вільну енергію утворення асоціатів показала домінуючий вплив гідрофобних взаємодій, підсилені електростатичним притяганням між взаємодіючими частинками. У роботі дослідили природу різнонаправленої зміни аналітичного сигналу ПАР у реакціях асоціації з флюоресцентними реагентами. Показано ступінчастий характер асоціації реагентів та іонних ПАР з утворенням стехіометричних, субстехіометричних і солюбілізованих асоціатів із різним співвідношенням компонентів. Встановлено, що зменшення інтенсивності флюоресцентного сигналу іонних ПАР спостерігається при утворенні гідрофобних стехіометричних асоціатів, а збільшення сигналу пов'язане із солюбілізаційними процесами при концентрації ПАР вище критичної концентрації міцелутворення (ККМ). Дослідженням аналітичного сигналу аніонних (АПАР) та катіонних (КПАР) поверхнево-активних речовин у двокомпонентних асоціатах з флюоресцентними реагентами виявлено ефекти «зарядової» та «просторово-гідрофобної» відповідностей, що проявляються у збільшенні сигналу ПАР. Додатково ці ефекти підсилюються при близькості зарядів протилежно заряджених частинок асоціатів типу аніонний реагент – катіонна ПАР та катіонний реагент – аніонна ПАР. Досліджено вплив заряду і гідрофобності реагентів та іонних ПАР у міцелярному середовищі неіонної ПАР (НПАР) Triton X 100 на спектральні зміни стехіометричних та солюбілізованих асоціатів. Встановлено, що максимальний аналітичний сигнал іонної ПАР у реакції з реагентами різного заряду та гідрофобності у розчинах Triton X 100 реєструється за умов «зарядової» відповідності між електронейтральною частинкою люмінолу та неіонною ПАР. Ефект «просторово-гідрофобної» відповідності між компонентами солюбілізованого асоціату реагент – іонна ПАР у розчинах неіонної ПАР зберігається. При цьому, зареєстровано зменшення впливу гідрофобності катіонних ПАР ряду алкілпіридиніїв на аналітичний сигнал у середовищі Triton X 100. На основі досліджених закономірностей реагент – іонна ПАР асоціатів у водних розчинах та середовищі Triton X 100 сформульовані основні чинники впливу та рекомендації по раціональному створенню модифікованих реагентних систем для флюоресцентного визначення гідрофобних органічних сполук іонної природи. Так, при конструюванні реагентної системи слід враховувати контрастність реакції асоціації органічного реагенту з ПАР, інтенсивність флюоресценції й гідрофобність барвника, наявність електростатичного притягання між протилежно зарядженими компонентами асоціату, «зарядову» та «просторово-гідрофобну» відповідності між взаємодіючими частинками при визначенні конкретних ПАР. Досліджено аналітичний сигнал органічних сполук катіонної природи та білків у реакції з комплексами Al(III) – люмогаліон та Mo(VI) – бромпірогалоловий червоний методами флюоресценції, спектрофотометрії та кольорометрії. Виявлено можливості цілеспрямованого використання гідрофобної модифікації металореагентних систем при визначенні органічних катіонів методами молекулярної спектроскопії з метою покращення метрологічних характеристик та якості аналітичного сигналу аналіту. Зареєстровано підвищення чутливості визначення органічних сполук іонної природи та білків у АПАР-, КПАР- та НПАР-модифікованих реагентних систем родаміну 6Ж, еозину Н, Al(III) – люмогаліон і Mo(VI) – бромпірогалоловий червоний. На основі досліджених закономірностей асоціації дво- та трикомпонентних систем реагент – іонна ПАР та реагент – іонна ПАР – неіонна ПАР, відповідно, цілеспрямованої гідрофобізації реагентних систем і проведених узагальнень розроблено методики флюоресцентного визначення гідрофобних органічних сполук іонної природи, зокрема білків.

2. The thesis is devoted to systematic research and evaluation of the combined effect of charge, nature, and hydrophobicity of organic reagents and surfactants on the fluorescent signal of the latter in solutions, identification of supramolecular matching effects in the association of reagents with surfactants, and development of practical recommendations for rational fluorescent determination of hydrophobic organic compounds of ionic nature, in particular proteins. The main factors influencing the analytical signal of the ionic surfactants in two-component reagent – surfactant associates are clarified. The combined effect of the hydrophobicity parameters of the associate components, the fluorescence intensity of the reagent, and the contrast of the association reaction

on the analytical signal of the surfactants in solutions has been established. The different nature of the formed two-component systems depending on the ratio of reagent and surfactant charges has been shown. As a result, the investigated associates were distributed depending on the ability of the reagents to exhibit electrostatic attraction with the surfactant ion. Anionic reagents that make an electrostatic contribution to the formation of reagent-surfactant systems are characterized by greater stability of the associates and give a greater analytical signal. The evaluation of electrostatic and hydrophobic contributions to the free energy of the associate formation showed the dominant effect of hydrophobic interactions enhanced by electrostatic attraction between the interacting particles. The nature of the multidirectional change of the analytical signal of surfactants in the association reactions with the fluorescent reagents has been investigated. The stepwise nature of the reagents and ionic surfactants associates with the formation of stoichiometric, substoichiometric, and solubilized associates with different ratios of components has been shown. It has been found that a decrease in the intensity of the ionic surfactants fluorescent signal is observed in the formation of hydrophobic stoichiometric associates, and an increase in the signal is associated with solubilization processes at surfactant concentrations above the critical micelle concentration. The study of the analytical signal of anionic and cationic surfactants in two-component associates with fluorescent reagents revealed the effects of «charge» and «spatial-hydrophobic» matching, which are manifested in the increase of the surfactant signal. The influence of charge and hydrophobicity of reagents and ionic surfactants in the micellar medium of non-ionic surfactant Triton X 100 on the spectral changes of stoichiometric and solubilized associates was studied. It has established that the maximum analytical signal of the ionic surfactant in reaction with reagents of different charge and hydrophobicity in Triton X 100 solutions is registered under the conditions of «charge» matching between the electroneutral particle of luminol and nonionic surfactant. The «spatial-hydrophobic» matching effect between the components of the solubilized associate reagent – ionic surfactant in solutions of nonionic surfactant is preserved. At the same time, a decrease in the effect of hydrophobicity of alkylpyridinium cationic surfactants on the analytical signal in the Triton X 100 medium has registered. Based on the studied regularities of reagent – ionic surfactants associate in aqueous solutions and Triton X 100 medium, the main factors of influence and recommendations for rational creation of modified reagent systems for fluorescent determination of hydrophobic organic compounds of ionic nature are formulated. Thus, the design of the reagent system should take into account the contrast of the association of the organic reagent with the surfactant, fluorescence intensity and hydrophobicity of the reagent, the presence of electrostatic attraction between oppositely charged components of the associate, «charge» and «spatial-hydrophobic» matching between interacting particles in the determination of specific surfactants. The analytical signal of organic compounds of cationic nature and proteins in the reaction with Al(III) – lumagalion and Mo(VI) – bromopyrohalol red complexes by the methods of fluorescence, spectrophotometry, and colorimetry has been studied. Possibilities of purposeful use of a hydrophobic modification of metal-reagent systems at the determination of organic cations by methods of molecular spectroscopy for improvement of metrological characteristics and quality of the analytical signal of analyte have been revealed. Based on the studied patterns of association of two- and three-component reagent – ionic surfactant and reagent – ionic surfactant – nonionic surfactant systems, respectively, purposeful hydrophobization of reagent systems and generalizations developed methods of fluorescent determination of hydrophobic organic compounds of ionic nature, in particular proteins.

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:**

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:**

**Підсумки дослідження:**

**Публікації:**

**Наукова (науково-технічна) продукція:**

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Куліченко Сергій Анатолійович

2. Kulichenko Sergey Anatolievich

**Кваліфікація:** к.х.н., 02.00.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Блажеєвський Микола Євстахійович

2. Blazheyevskiy Mykola Yevstahiyovych

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Зуй Олег Вікторович
2. Zuy Oleh Viktorovych

**Кваліфікація:** д.х.н., 21.06.01**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:****Код за ЄДРПОУ:****Місцезнаходження:****Форма власності:****Сфера управління:****Ідентифікатор ROR:** Не застосовується**Рецензенти****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Кеда Тетяна Євгенівна
2. Keda Tetyana Ye.

**Кваліфікація:** к. х. н.**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:****Код за ЄДРПОУ:****Місцезнаходження:****Форма власності:****Сфера управління:****Ідентифікатор ROR:** Не застосовується**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Трохимчук Анатолій Костянтинович
2. Trokhymchuk Anatolij Kostyantynovych

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.01, 02.00.02**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:****Код за ЄДРПОУ:****Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## **VIII. Заключні відомості**

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

Пивоваренко Василь Георгійович

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

Пивоваренко Василь Георгійович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.