

АНОТАЦІЯ

Демидов О.О. Синтез та дослідження протолітичних рівноваг похідних 4'-гідроксифлавонолу. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 102 Хімія (Галузь знань 10 Природничі науки). – Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна Міністерства освіти і науки України, Харків, 2025.

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 4'-гідроксифлавонолу, аналізу структури цих сполук, дослідженню їх кислотно-основних властивостей в неводному середовищі, вивченню їх впливу на перенос іонів металів в двофазних 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 4'-гідроксифлавонолу у основному та збудженому станах із використанням методів спектрофотометрії, флуоресцентного аналізу. Шляхом молекулярного докінгу і флуоресцентного титрування дослідження зв'язування 4'-гідроксифлавонолів з молекулами білка – β -глюкозидази.

Оцінено вплив комплексоутворення 4'-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 4'-

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.

Ключові слова: флавоноїди, флавоноли, органічний синтез, реакції окислювальної циклізації, кислотно-основні рівноваги, таутомерія, протолітичні форми, спектрально-флуоресцентні властивості, фотолюмінесценція, метало-комплекси, гетерогенний каталіз, молекулярний докінг.

ABSTRACT

Demidov O.O. Synthesis and study of protolytic equilibria of 4'-hydroxyflavonol derivatives. – Qualification scientific work in the form of a manuscript.

Dissertation for the degree of Doctor of Philosophy in specialty 102 Chemistry (Field of knowledge 10 Natural sciences). – V.N. Karazin Kharkiv National University of the Ministry of Education and Science of Ukraine, Kharkiv, 2025.

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 4'-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 ^{13}C NMR), mass spectrometry, and X-ray crystallography.

Special attention was given to the study of protolytic equilibria of 4'-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 4'-hydroxyflavonols to the protein β -glucosidase.

The impact of complexation between 4'-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 4'-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.

Keywords: flavonoids, flavonols, organic synthesis, oxidative cyclization reactions, acid-base equilibria, tautomerism, protolytic forms, absorption and fluorescent properties, photoluminescence, complexes with metal ions, heterogenic catalysis, molecular docking.