

## ВИСНОВОК

наукового керівника щодо виконання  
індивідуального плану наукової роботи, індивідуального навчального плану  
та роботи над дисертацією **Тростянка Павла Вікторовича**  
**«Молекулярний дизайн та синтез нових похідних кумарину та 2-оксохіноліну з**  
**регульованими фотофізичними та фармакологічними властивостями»,**  
яка подається на здобуття ступеня доктора філософії  
з галузі знань 10 Природничі науки  
за спеціальністю 102 Хімія

Тростянко Павло Вікторович у 2021 році закінчив хімічний факультет Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна та вступив до аспірантури кафедри органічної хімії хімічного факультету. Навчальна складова індивідуального плану виконання освітньо-наукової програми підготовки доктора філософії та роботи над дисертацією Тростянка П. В. виконана вчасно та у повному обсязі.

Робота Тростянка П. В. над темою дисертації почалась з накопичення емпіричної бази дослідження, а саме розробки методів синтезу комбінаторної бібліотеки похідних 3-(5-феніл-1,3,4-оксодіазол-2-іл)кумаринів та дослідження їх електронних спектрів поглинання та флуоресценції. Тростянко П. В. поглиблено вивчив сучасну літературу за темою дисертації. Ним було критично проаналізовано сучасні наукові публікації та огляди з тематики сенсibilізованих барвників сонячних комірок, досліджено методологію побудови органічних барвників-сенсibilізаторів на основі похідних кумарину та хіноліну. Крім того, за грантовою програмою 2021.01/0062 «Молекулярний дизайн, синтез та скринінг нових потенційних противірусних фармацевтичних інгредієнтів для терапії інфекційного захворювання COVID-19» НФДУ (державний реєстраційний номер: 0123U102849), аспірантом було проаналізовано літературні джерела за темою конструювання та синтезу інгібіторів протеаз MPro та PLPro коронавірусу SARS-COV-2.

На першому етапі роботи, перед Тростянко П. В. було поставлено задачу розробити методи синтезу похідних 3-гетарилкумарину та провести їх модифікації за реакцією крос-сполучення Судзукі-Міяури. Аспірантом було досліджено специфіку проведення термічної реакції рециклізації 2-ароїлгідразонокумаринів термогравіметричним методом. На основі отриманих результатів, було розроблено ефективний метод синтезу 3-(1,3,4-оксодіазол-2-іл)- та 3-(1,2,4-триазол-2-іл)кумаринів з використанням реактора з підвищеним тиском і температурою Anton Paar Monowave 50, дотримуючись сучасних принципів “зеленої хімії”. Виміряно електронні спектри поглинання серії похідних 3-(5-феніл-1,3,4-оксодіазол-2-іл)кумаринів в розчинниках різної природи, з метою порівнювального аналізу спектральних властивостей органічних  $\pi$ -спряжених систем напівемпіричним методом квантово-хімічних розрахунків з використанням методу DFT.

На наступному етапі, аспірантом Тростянко П. В. було досліджено методологію синтезу моно- та дифеніл заміщених саліцилових альдегідів. Саліцилові альдегіди є важливими білдинг-блоками для синтезу біологічно активних речовин, ліганд комплексують, флуоресцентних зондів, зокрема флуоресцентних барвників та

барвників-сенсibilізаторів для DSSC. Аспірантом розроблено методику синтезу моно- та дифеніл заміщених саліцилових альдегідів за реакцією крос-сполучення Судзукі-Міяури, досліджено та запроваджено можливості “озеленення” відповідної реакції. Також було проаналізовано молекулярні структури потенційних нековалентних інгібіторів подвійної дії для протеаз MPro та PLPro коронавірусу SARS-COV-2 шляхом віртуального скринінгу та докінгу та синтезовано деякі з віртуальних хітів.

На останньому етапі роботи було розроблено ефективні методики синтезу флуоресцентних моно- та дифенілзаміщених кумарин-3-карбонових кислот та їх етилових естерів та визначено характеристики поглинання в УФ-діапазоні та флуоресценції у розчинниках різної полярності: неполярному (циклогексан) та полярному апротонному (ацетонітрил). Крім того, проведено розрахунки на основі теорії часо-залежного функціоналу густини (TD-DFT), які забезпечили детальний аналіз електронних ефектів фенільного заміщення. За результатами порівняльного спектрального аналізу і теоретичного вивчення взаємозв'язку структура–флуоресценція, визначено що 7-фенілзаміщені 3-кумаринкарбонові кислоти серед досліджених похідних становлять перспективну платформу для створення інноваційних флуоресцентних матеріалів, зокрема для лазерних барвників, барвників-сенсibilізаторів для сонячних комірок, оптоелектроніки та інших галузей. Також аспірантом було розроблено методику синтезу та синтезовано бібліотеку N-алкіл-3-(феніламінометил)-2-оксохінолінів, які мають потенціал подвійного інгібування, для подальших досліджень *in vitro* з метою відкриття ліків проти COVID-19.

Під час навчання в аспірантурі Тросянко П. В. набув цілу низку компетентностей, необхідних для дослідницької роботи. Серед них здатність до самостійної постановки та творчого розв'язання складних наукових задач, спроможність до аналізу та застосування сучасних методів органічного синтезу, навички підготовки та виконання науково-дослідних проєктів та робіт, планування та проведення експериментальних та теоретичних дослідів. Зокрема, Тросянко П. В. опанував навички ретросинтетичного аналізу, оптимізації методів синтезу згідно з принципами “зеленої хімії”, дослідження фотофізичних та фармакологічних властивостей синтезованих сполук. Про його вміння оприлюднювати наукові результати та високий рівень володіння англійською мовою свідчить стаття в міжнародному журналі, що входить до наукометричної бази Scopus, та численні доповіді на міжнародних та всеукраїнських конференціях.

Працюючи над дисертацією, Тросянко П. В. проявив себе працелюбним, вдумливим, талановитим дослідником з широкою науковою ерудицією та аналітичними здібностями. Він бере активну участь у науковому та громадському житті кафедри і університету.

Дисертаційна робота Тросянко Павла Вікторовича «Молекулярний дизайн та синтез нових похідних кумарину та 2-оксохіноліну з регульованими фотофізичними та фармакологічними властивостями» яка подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії з галузі знань 10 – Природничі науки за спеціальністю 102 – Хімія є актуальною, завершеною науковою працею, що виконана на належному науково-теоретичному та практичному рівні з логічно та доступно викладеним матеріалом, в якій отримано нові науково обґрунтовані результати. Висновки, сформульовані дисертантом,

відзначаються обґрунтованістю, достовірністю, вагомих теоретичним на практичним значенням.

Таким чином, вважаю, що наукова складова індивідуального плану роботи аспіранта Тростянка Павла Вікторовича виконана повністю та на високому рівні.

Науковий керівник,  
доктор хімічних наук,  
професор кафедри органічної хімії,  
Харківського національного університету  
імені В. Н. Каразіна

Сергій КОВАЛЕНКО

Підпис Сергія Коваленко засвідчую

Начальник відділу кадрів  
Харківського національного університету  
імені В. Н. Каразіна



Олена ГРОМИКО