

ЗАТВЕРДЖЕНО

Наказ Міністерства освіти і науки України

24 квітня 2024 року № 578

Рішення
разової спеціалізованої вченої ради
про присудження ступеня доктора філософії

Здобувач ступеня доктора філософії Тростянка Павло Вікторович,

1998 року народження, громадянин України,

освіта вища: закінчив у 2022 році Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна

за спеціальністю (спеціальностями) хімік

виконав акредитовану освітньо-наукову програму «Сучасні напрямки розвитку
фундаментальної хімії та їх прикладна перспектива»
(Сертифікат про акредитацію №1221, дійсний до 01.07.2026 р.)

Разова спеціалізована вчена рада, утворена наказом Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна м. Харків, від « 23 » червня 2025 року № 0114-1/295

у складі:

Голови разової спеціалізованої вченої ради -

РОШАЛЬ Олександр Давидович, доктор хімічних наук (02.00.04 – Фізична хімія), професор, професор кафедри хімічного матеріалознавства хімічного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна

Рецензентів -

КОЛОС Надія Миколаївна, доктор хімічних наук (02.00.03 – органічна хімія), професор, професор кафедри органічної хімії хімічного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна

КОЛОСОВ Максим Олександрович, кандидат хімічних наук (02.00.03 – органічна хімія), доцент, доцент ЗВО кафедри органічної хімії хімічного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна

Офіційних опонентів -

ЧЕБАНОВ Валентин Анатолійович, доктор хімічних наук, (02.00.03 – органічна хімія), професор, академік АН України, Державна наукова установа «Науково-технологічний комплекс «Інститут монокристалів» НАН України, перший заступник генерального директора з наукової роботи, директор інституту хімії функціональних матеріалів

ЖУРАВЕЛЬ Ірина Олександрівна, доктор хімічних наук (02.00.03 – органічна хімія), професор, Національний фармацевтичний університет, МОЗ України, професор кафедри фармацевтичної технології, стандартизації та сертифікації ліків

на засіданні «25» серпня 2025 року прийняла рішення про присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки Тростянку Павлу Вікторовичу.

на підставі публічного захисту дисертації «Молекулярний дизайн та синтез нових похідних кумарину та 2-оксохіноліну з регульованими фотофізичними та фармакологічними властивостями» за спеціальністю 102 Хімія відповідно до Переліку галузей знань і спеціальностей, за якими здійснюється підготовка здобувачів вищої освіти)

Дисертацію виконано в Харківському національному університеті ім. В.Н. Каразіна, м. Харків, науковий керівник КОВАЛЕНКО Сергій Миколайович, доктор хімічних наук (02.00.03 – органічна хімія), професор, професор кафедри органічної хімії хімічного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна.

Дисертацію подано у вигляді спеціально підготовленого рукопису. Здобувач (ка) має 4 наукові публікації за темою дисертації, з них:

1. Yevsieieva, L., Trostianko, P., Kyrychenko, A., Ivanov, V., Kovalenko, S., Kalugin, O. Design of non-covalent dual-acting inhibitors for proteases MPRO and PLPRO of coronavirus SARS-CoV-2 through evolutionary library generation, pharmacophore profile matching, and molecular docking calculations. *ScienceRise: Pharmaceutical Science*, **2024**, 6(52), 15–26. DOI: <https://doi.org/10.15587/2519-4852.2024.313808> (Scopus, Web of Science, Q3)

2. Тростянко, П., Пашко, В., Коваленко, С. Синтез моно- та дифеніл заміщених саліцилових альдегідів, важливих білдінг-блоків для синтезу флуоресцентних барвників та барвників-сенсифікаторів для DSSC. *Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Серія «Хімія»*, **2024**, 43, 56-62. DOI: <https://doi.org/10.26565/2220-637X-2024-43-05>

3. Anokhin, D., Kovalenko, S., Trostianko, P., Kyrychenko, A., Zakharov, A., Zubatiuk, T., Ivanov, V., Kalugin, O. Towards the discovery of molecules with anti-COVID-19 activity: Relationships between screening and docking results. *Kharkiv University Bulletin. Chemical Series*, **2024**, 42, 6-14. DOI: <https://doi.org/10.26565/2220-637X-2024-42-01>

4. Іванов, В., Тростянко, П., Коваленко, С., Володченко, А., Черножук, Т., Степанюк, Д., & Калугін, О. Квантовохімічні розрахунки електронних спектрів поглинання: Ab initio чи напівемпірика?. *Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна. Серія «Хімія»*, **2021**, 36, 33-43. <https://doi.org/10.26565/2220-637X-2021-36-06>

У дискусії взяли участь голова, рецензенти, офіційні опоненти та висловили зауваження:

КОЛОС Надія Миколаївна, доктор хімічних наук (02.00.03 – Органічна хімія), професор, професор кафедри органічної хімії хімічного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна оцінила роботу позитивно, висловила наступні питання, які мають уточнювальний характер:

1. Чи можна вважати н-бутанол зеленим розчинником? Які аргументи є у автора на користь такого твердження?

2. Як покращує екологічність процесу наведений вами синтез фенілсаліцилового альдегіду на відміну від описаного в літературі з використанням додецилсульфату натрію?

3. Наскільки принциповим є введення 1,4-діоксинового фрагмента в молекули похідних хінолін-2-ону для інгібування активності протеаз SARS-COV-2?

Професор Колос зазначила, що ці питання не є суттєвими, не стосуються наукової новизни та основних висновків дисертаційної роботи.

КОЛОСОВ Максим Олександрович, кандидат хімічних наук (02.00.03 – Органічна хімія), доцент, доцент ЗВО кафедри органічної хімії хімічного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна зазначив наступне:

1. Загалом робота виглядає сирою та важко сприймається як єдине дослідження.
2. Оформлення роботи часто не відповідає чинному ДСТУ 3008:2015 «Звіти у сфері науки і техніки».
3. Серед методів та підходів не вказано органічний синтез, що викликає здивування.
4. Чи варто в розділі «Особистий внесок здобувача» вказувати аналіз літературних джерел?
5. Перелік умовних позначень оформлений не за алфавітом.
6. Дивним є виділення частини роботи «Матеріали і методи дослідження» обсягом аж 3 сторінки в окремий розділ, а, з іншого боку, наведення експериментальних частин у розділах 3 та 4. На мій погляд, доцільно усі експериментальні методики звести в один розділ.
7. Висновки до розділів 3 та 4 не містять конкретної стислої інформації про результати досліджень, і, на мою думку, їх варто переробити.

Не зважаючи на зауваження, доцент Колосов наголосив, що здобувач ТРОСТЯНКО Павло Вікторович заслуговує на присудження їй наукового ступеня доктора філософії з галузі знань 10 – Природничі науки за спеціальністю 102 Хімія.

ЧЕБАНОВ Валентин Анатолійович, доктор хімічних наук, (02.00.03 – органічна хімія), професор, академік АН України, Державна наукова установа «Науково-технологічний комплекс «Інститут монокристалів» НАН України, перший заступник генерального директора з наукової роботи, директор інституту хімії функціональних матеріалів, звернув увагу на наступні питання і зробив зауваження:

1. При широкому використанні напівемпіричних методів та теорії функціоналу густини автор проігнорував методи *ab initio* (Гартрі – Фока, Меллера – Плессета). З чим це пов'язано?
2. Дуже цікаво було б порівняти результати синтезів, що виконані в ректорі Monowave 50, з таким ж синтезами, що проведені в справжніх мікрохвильових реакторах.
3. Було б доцільно використати для порівняння «зеленості» розчинників відомі в літературі індекси їхньої дружності до довкілля, а для реакцій – кількісні критерії їхньої відповідності зеленій хімії.
4. Мета роботи, що наведена в анотації (стор. 3) і у вступі (стор. 16) різні по своїй суті і, відповідно, не зрозуміло, яка мета є основною і досягнута в ході виконання дослідження (перший «загальний» висновок не вносить ясність в це питання).
5. На стор. 57 вказано «Проведення реакції крос-сполучення при 80°C привело до низької конверсії вихідного бромпохідного з незадовільним виходом продукту, що вказано в таблиці 1». Але в таблиці 3.8 (яка помилково вказана, як таблиця 1, в якій помилково вказані номери сполук 2, 3, 5) немає даних про конверсію, а лише про виходи. Чи робився аналіз саме конверсії?
6. На стор. 64 зазначено «За результатами проведеної серії експериментів, було визначено, що при проведенні реакції в класичних умовах використання каталізатора $\text{Pd(PPh}_3)_4$ дає дещо кращий результат за 10% Pd/C , але в надкритичних умовах ця різниця майже нівелюється...». Насправді в дисертації мова не йде про надкритичні умови (supercritical conditions), тобто про температури та тиск, вищі за критичну точку. Зазначені умови не є навіть навіколокритичними (near critical conditions).

7. На мій погляд у висновках до розділу 3 є ще одна термінологічна некоректність – ВЗЛР та САМ-ВЗЛР є не методами, а є функціоналами методу DFT / TD-DFT.

8. Текст дисертації містить значну кількість помилок, зокрема:

- плутанини з номерами сполук в тексті і в таблицях (стор. 43, 45, 48, 52, 57, 58, 59, 67), номерами таблиць (стор. 57, 59, 63, 72), рисунків (стор. 63);

- на стор. 4 при описанні новизни дисертації написано «Представлені в статті дані...»

- стор. 93 і 94 – два рази повторюється один і той же абзац - використанні української аббревіатури поруч з англійською (ТГА/ДТГ і TGA/DTG на стор. 49-50)

- інші помилки в тексті дисертації.

Також професор Чебанов зазначив, що перераховані питання і зауваження не є суттєвими, не впливають на загальне позитивне враження від дисертаційної роботи та не знижують її цінність та достовірність.

ЖУРАВЕЛЬ Ірина Олександрівна, доктор хімічних наук (02.00.03 – органічна хімія), професор, Національний фармацевтичний університет, МОЗ України, професор кафедри фармацевтичної технології, стандартизації та сертифікації ліків.

Оцінюючи дисертаційну роботу Тростянка П. В. в цілому позитивно, професор Журавель висловила деякі міркування та зауваження:

1. В табл. 3.1 відсутні пояснення щодо структур, для яких проведено розрахунки (3.1 – 3.5.4) та щодо використаних систем 1-4. Не зрозуміло, для яких молекул наведено дані розрахунків в табл. 3.2. В табл. 3.3 відсутнє пояснення щодо структур та середовищ, для яких проводили розрахунки.

2. В роботі забагато граматичних помилок, стилістичних неузгоджень, невдалих формулювань. Відсутні чітко виписані задачі дослідження. Наукова новизна сформульована некоректно. Загальні висновки мають бути більш конкретними.

3. Не витримано послідовність нумерації сполук.

4. Некоректна назва таблиць (табл. 3.4, 3.5, 3.8, 3.9, 4.1, 4.15) та рисунків (рис. 4.6, 4.8, 4.12, 4.13, 4.17).

5. Наявні помилки в інтерпретації спектрів ЯМР (сполуки 3.9.2, 3.9.4, 3.11.7 тощо).

Також були поставлені наступні запитання:

1. Вами проведено дослідження термічного перегрупування 2-(ароїлгідрозоно)кумарин-3-карбоксамідів на відповідні 3-арил-1,2,4-триазол-2-ілкумарини. Чи можна розширити ряд субстратів для проведення аналогічних перетворень? Якими можуть бути загальні рекомендації щодо умов реакції?

2. Які три продукти зафіксовані в реакції одержання 3-(5-([1,1'-біфеніл]-4-іл)-1,3,4-оксадіазол-2-іл)кумарину 3.12.1 (табл. 3.8)? Поясніть зміну напрямку реакції в експерименті 6 і 7.

3. Яким чином можна пояснити механізм подвійного інгібування протеаз?

Результати відкритого голосування:

«За» 5 членів ради,

«Проти» немає членів ради.

На підставі результатів відкритого голосування разова спеціалізована вчена рада

присуджує Тросянку Павлу Вікторовичу ступінь доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 102 Хімія.

Відеозапис трансляції захисту дисертації додається.

Голова разової спеціалізованої вченої ради

(підпис)

Олександр РОЩАЛЬ

(власне ім'я та прізвище)

М.П.

Онлайн сервіс створення та перевірки кваліфікованого та удосконаленого електронного підпису

ПРОТОКОЛ
створення та перевірки кваліфікованого та удосконаленого електронного підпису

Дата та час: 13:34:06 25.08.2025

Назва файлу з підписом: Рішення разової ради про присудження ступеня_Тростянко.pdf.p7s
Розмір файлу з підписом: 551.4 КБ

Перевірені файли:

Назва файлу без підпису: Рішення разової ради про присудження ступеня_Тростянко.pdf
Розмір файлу без підпису: 534.1 КБ

Результат перевірки підпису: Підпис створено та перевірено успішно. Цілісність даних підтверджено

Підписувач: РОШАЛЬ ОЛЕКСАНДР ДАВИДОВИЧ

П.І.Б.: РОШАЛЬ ОЛЕКСАНДР ДАВИДОВИЧ

Країна: Україна

РНОКПП: 2280500855

Організація (установа): ФІЗИЧНА ОСОБА

Час підпису (підтверджено кваліфікованою позначкою часу для підпису від Надавача): 13:34:06 25.08.2025

Сертифікат виданий: КНЕДП АЦСК АТ КБ "ПРИВАТБАНК"

Серійний номер: 5E984D526F82F38F04000000E90E8601AFE29906

Алгоритм підпису: ДСТУ 4145

Тип підпису: Удосконалений

Тип контейнера: Підпис та дані в одному файлі (CAAdES enveloped)

Формат підпису: З повними даними ЦСК для перевірки (CAAdES-X Long)

Сертифікат: Кваліфікований

Версія від: 2025.08.04 13:00