Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U101610

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шатрава Юлія Олександрівна
2. Shatrava Yuliia Oleksandrivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.01

Назва наукової спеціальності: Неорганічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 19-04-2021

Спеціальність за освітою: Хімія

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): Д 26.001.03

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

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: 31.17.15

Тема дисертації:

1. Координаційно-хімічні властивості деяких фосфорильованих карбамідів і сульфамідів

2. Coordination - chemical properties of some phosphorylated ureas and sulfamides

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена синтезу та вивченню координаційно-хімічних властивостей окремих представників фосфорильованих карбамідів (КАФ) і сульфамідів (САФ), встановленню взаємозв'язку між будовою лігандів та складом і властивостями координаційних сполук на їх основі. Синтезовано та виділено в індивідуальному стані 42 нові координаційні сполуки перехідних металів. Комплекси досліджено методами ІЧ, ЯМР (1H та 31P), електронної та люмінесцентної спектроскопії, термогравіметричного та рентгеноструктурного аналізу. В результаті дослідження вперше було зафіксовано три нові типи координації КАФ та САФ лігандів та встановлено взаємозв'язок між природою замісників біля атомів сульфуру/карбону і фосфору хелатуючого фрагменту та способом координації лігандів до центрального йону металу. Показано, що досліджувані КАФ ліганди координуються бідентатно через атом оксигену карбонільної групи і атом нітрогену гетероциклу з утворенням шестичленного металоциклу як у нейтральній, так і в ацидоформі. На прикладі комплексів з фосфорильованими сульфамідами вдалося простежити вплив стеричного фактору на координаційно-хімічні властивості лігандів та будову комплексів. Вперше в межах одного комплексу {AgL3}n зареєстрована бідентатно-хелатна та бідентатно-містковa координація сульфамідних лігандів до йону арґентуму та монодентатна координація САФ лігандів в молекулярній формі у комплексах складу UO2(HL3,4)2(NO3)2. Для кристалічних координаційних сполук європію Eu(L3)3•Phen та Na[Eu(L4)4] на основі аналізу спектрів люмінесценції запропоновано симетрію оточення центрального атому та визначено часи життя збудженого стану (1.44 мс та 1.3 мс, відповідно). Виявлено, що одержані КАФ ліганди проявляють часо- та дозозалежний цитотоксичний ефект щодо клітин лейкозу L1210. Ключові слова: фосфорильовані карбаміди, сульфаміди, координаційні сполуки лантаноїдів, КАФ, САФ, спектроскопія, кристалічна будова, люмінесценція, HOMO, LUMO.

2. One of the promising areas of development of modern coordination chemistry is the creation of new ampolydentate ligands that are able to form kinetically, thermodynamically and thermally stable metal complexes with valuable properties. Due to phosphoryl group has a high affinity for most metals, phosphoryl-containing ligands attract a special attention of researchers in the synthesis of new metal complexes for modern technologies. One way to create the new ligand systems is to modify the structure of known classes of ligands, which already have a wide and diverse application. The substitution of carbon atoms in the structure of widely used □-diketones by heteroatoms leads to the formation of their structural analogues - carbacyl- and sulfonylamidophosphates, which have recently proved to be powerful ligand systems. The possibility of varying the nature and size of the substituents at the functional core allows obtaining new complexes with potentially useful properties. The aim of this work was to trace the relationship between the structure of ligands, the method of their coordination to transition metal ions, the structure of the resulting complexes and their properties. Two representatives of phosphorylated ureas - (CAPh) ligands, containing 2-aminothiazole and 2-aminopyridine fragments, and two phosphorylated sulfamide (SAPh) ligands, which differ by nature of substituents near the phosphorus atom, were synthesized. In the structure of dimethyl[(1,3-thiazol-2-ylamino)carbonyl]amidophosphate, the binding of molecules to a centrosymmetric dimer by four hydrogen bonds was recorded for the first time for urea derivatives. For 2-aminopyridine-containing ligand a polymeric structure is realized. As a result of the study, three new types of coordination mode for CAPh and SAPh ligands were found for the first time: 1) the [dimethyl[(1,3-thiazol-2-ylamino)carbonyl]-amidophosphate (H2L1) and dimethyl-[(pyridin-3-ylamino)carbonyl]amidophosphate (H2L2)) are coordinated in bidentate manner via the carbonyl oxygen and the nitrogen atom of heterocycle with the formation of a six-membered chelated metalcycle in both neutral and acidoform. 2) bidentate-bridge coordination for N-[bis(diethylamino)phosphoryl]benzene-sulfonamide (HL3) to the silver ion via the oxygen atoms of the phosphoryl group and amide nitrogen atoms, resulting formation of polymer one-dimensional chains {AgL3}n; 3) monodentate coordination of SAPh ligands in molecular form via the oxygen atom of the phosphoryl group was registered (in UO2(HL3,4)2(NO3)2 complexes). As a result of biological studies the time- and dose-dependent cytotoxic effect of the urea obtained on L1210 leukemia cells was demonstrated. In this study it was possible to trace the influence of steric factor on the coordination capabilities of sulfamide-type ligands and the structure of complexes. Due to steric peculiarities created by the presence of shielding ethyl substituents near the phosphorus atom, which are able to prevent the formation of intermolecular contacts, it was not possible to obtain tetrakis-

lanthanide complexes with the HL3 ligand. In addition, the steric complications that create ethyl substituents allowed obtaining a molecular tris-complex of lanthanide Lu(L3)3 with an uncharacteristic low coordination number Lu3+ 6. On the other hand, the spatial structure of dimorpholine[phenylsulfonyl]-amidophosphate (HL4) allowed to obtain tetrakis-complexes of the composition {Na[Nd(L4)4]}n with a polymer structure that is typical for similar anionic complexes with sodium cation. The crystal structure of this complex contains large pores (790 Å3), and the thermogravimetric analysis showed the absence of solvent molecules. Upon UV light photoexcitation, the europium complexes Eu(L3)3•Phen and Na[Eu(L4)4] show bright red luminescence with an emission lifetime of 1.44 ms and 1.3 ms. Thermogravimetric studies of all complexes showed their thermal stability up to 200°C, which opens new opportunities for practical use of the compounds obtained. Keywords: phosphorylated ureas, sulfamides, lanthanides coordination compounds, CAPh, SAPh, spectroscopy, crystal structure, luminescence, HOMO, LUMO.

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 ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Амірханов Володимир Михайлович
2. Amirkhanov Volodymyr

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.01

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. Орисик Світлана Іванівна

2. Orysyk Svitlana Ivanivna

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.01

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. Русанов Едуард Борисович

2. Rusanov Eduard Borysovych

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.08

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. Кокозей Володимир Миколайович

2. Kokozay Volodymyr Mykolayovych

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.01

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. Зуб Віра Яківна

2. Zub Vira Yakivna

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.01

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 — Слободяник Микола Семенович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні — Слободяник Микола Семенович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності — Юрченко Т.А.