Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0420U102304

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-12-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Вакаров Сергій Васильович
2. Vakarov Serhii V.

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: 17-12-2020

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, 32/34, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.218.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, 32/34, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, 32/34, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

Тема дисертації:

1. Синтез і властивості несиметрично дизаміщених клатрохелатних комплексів Феруму(II)
2. Synthesis and properties of asymmetrically substituted iron(II) clathrochelate complexes

Реферат:

1. Дисертацію присвячено синтезу та дослідженню несиметричних дизаміщених клатрохелатних комплексів Феруму(II) та індукції хіральності отриманих комлексів в хіральному середовищі. В дисертаційній роботі представлено нові методи синтезу клатрохелатних комплексів Феруму(II) з різними арил- та алкілсульфідними замісниками на одному ребрі як шляхом постадійного нуклеофільного заміщення відомих та відносно легкодоступних дигалогензаміщених клатрохелатних комплексів, так і функціоналізації карбоксигрупи в складі реберних замісників клатрохелатних комплексів. Запропоновано стратегію синтезу дизаміщених клатрохелатних комплексів з наступними замісниками на одному ребрі: з двома кінцевими карбоксигрупами; з карбокси і естерною групами;з карбокси і амідною групами; з двома амідними групами; з двома естерними групами. Загалом, синтезовано та встановлено склад і будову 32 нових комплексів. Структури 4 з них встановлено методом рентгеноструктурного аналізу. Вперше виявлено хіральні

властивості клатрохелатних комплексів Феруму(II). Синтезовано модельні сполуки, в складі яких міститься ковалентно зв'язаний оптично активний індуктор (R-фенілетиламін). При наявності такого індуктора з'являється відгук у спектрах кругового дихроїзму (КД). На основі дослідження хірооптичних властивостей клатрохелатних комплексів Феруму(II) встановлено залежність інтенсивності відгуку в спектрах КД клатрохелатних комплексів від місця розташування та типу хірального індуктора. За допомогою квантовохімічних методів розраховано спектри КД для обох енантіомерів клатрохелатного комплексу та порівняно з експериментальними. Визначено абсолютну конформацію клатрохелатнів у розчині хлороформу та толуені. Показано, що конформація реберних замісників пов'язана з конформацією металополіедру внаслідок їх спряження з макробіциклічним каркасом. Запропоновано модель індукції хіральності, згідно якої основним методом передачі такої індукції є взаємодія оптичного індуктора з ароматичними реберними замісниками, що зміщує рівновагу переходу між конформаціями металополіедру та викликає виникнення спектрів КД. В дисертації також представлено дослідження структурних особливостей клатрохелатних комплексів, що призводять до утворення стійкого супрамолекулярного ансамблю «клатрохелат-білок».

2. The dissertation presents new methods for the synthesis of iron(II) clathrochelate complexes with different aryl- and alkylsulfide substituents on one rib both by step-by-step nucleophilic substitution of known and relatively readily available dihalogenoclathrochelate complexes and functionalization of complexes with terminal carboxy groups. A strategy for the synthesis of disubstituted clathrochelate complexes with the following substituents on one rib is proposed: with two terminal carboxy groups; with carboxy and ester groups, with carboxy and amide groups; with two amide groups; with two ester groups. In total, 32 new complexes were synthesized. Their composition and structure were established. The structures of four of the complexes were obtained by X-ray diffraction analysis of single crystals. Optical activity of iron (II) clathrochelate complexes were discovered for the first time. Model compounds with covalently coupled optically active inductor (R-phenylethylamine) have been synthesized. In the presence of such inductor, a response appears in the spectra of circular dichroism (CD). Based on the study of the chirooptical properties of iron(II) clathrochelate complexes, the dependence of the intensity in the CD spectra of clathrochelate complexes on the location and type of chiral inductor was established. Using quantum chemical methods, theoretical CD spectra for both enantiomers of clathrochelate complex were calculated and compared with the experimental ones. Based on this comparison the preferable conformation of the clathrochelate's polyhedra in solution was found. A possible mechanism of chirality induction is proposed, according to which the main way of transmission of such induction is the interaction of an optical inductor with aromatic rib substituents. Due to their conjugation with the macrobicyclic framework, the conformation of the rib substituents influence the conformation of the metal polyhedron, which causes the formation of CD spectra. The dissertation also presents a brief study of the structural features of clathrochelate complexes that lead to the formation of stable supramolecular complexes "clathrochelate - protein".

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. Варзацький Олег Анатолійович

2. Varzatskii Oleg A.

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. Лампека Ярослав Дмитрович

2. Lampeka Yaroslaw D.

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. Плутенко Максим Олександрович

2. Plutenko Maksym O.

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Пехньо Василь Іванович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Пехньо Василь Іванович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.