Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U002555

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-07-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Жуковецька Олена Михайлівна

2. Olena Zhukovetska

Кваліфікація: 102

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: хімія

Дата захисту: 27-06-2024

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 55.102.2024 / ID 5749

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

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

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.19, 31.17.29

Тема дисертації:

1. Хімічно-ініційована міцелярна екстракція та її застосування для концентрування і визначення Германію(IV) спектроскопічними методами.

2. Chemically initiated cloud point extraction and its application for preconcentration and determination of Germanium(IV) by spectroscopic methods.

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено вивченню особливостей утворення хімічно-індукованих міцелярних фаз нейоногенних поверхнево-активних речовин (ПАР), встановленню їх екстракційної здатності щодо комплексів Ge(IV) з 2,4-заміщеними похідними 6,7-дигідроксибензопірилію та розробці відповідних комбінованих спектроскопічних методик його визначення. У вступі обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету та завдання дослідження, зазначено наукову новизну і практичну значимість отриманих результатів. У першому розділі представлено огляд літератури, систематизовані дані літературних джерел щодо сучасного стану та перспектив розвитку методів рідинної екстракції. Особливу увагу зосереджено на міцелярно-екстракційному концентруванні та відповідних сучасних модифікаціях. У другому розділі наведено опис використаних реактивів, характеристики устаткування та обладнання, які

застосовували у роботі. Представлені методики синтезу та ідентифікації похідних 6,7-дигідроксибензопірилію, які використовувались в даній роботі. Наведено методики, умови й основні етапи експериментальних досліджень. Третій розділ присвячено вивченню сольватохромних властивостей ряду похідних перхлорату 6,7-дигідроксибензопірилію: 6,7-дигідрокси-2,4-диметилбензопірилію, 6,7-дигідрокси-2-феніл-4-метилбензопірилію та 6,7-дигідрокси-2,4-дифенілбензопірилію. Вплив природи органічних розчинників досліджено на прикладі метанолу, етанолу, н-пропанолу, ізо-пропанолу, н-бутанолу, ізо-бутанолу, н-пентанолу, ізо-пентанолу, н-гексанолу, н-гептанолу, н-нонанолу, деканолу, диметилформаміду, диметилсульфоксиду, тетрагідрофурану, ацетонітрилу, бутилацетату, толуену та хлороформу. Показано, що при заміні полярного розчинника менш полярним спостерігається батохромний зсув максимуму смуги поглинання похідних 6,7-дигідроксибензопірилію, що відповідає nπл* електронному переходу. Відзначено, що спостерігається задовільна кореляція (R = 0,795-0,993) між положенням максимуму поглинання барвника і величинами параметру Хансена, Камлета-Тафта, донорним та акцепторним числом за Гутманом. Четвертий розділ присвячено дослідженню комплексоутворення Германію(IV) з низкою алкіл- та феніл- похідних 6,7-дигідроксибензопірилію. Склад комплексів Ge(IV):R = 1:2 встановлено класичними спектрофотометричними методами. На підставі сукупності даних запропоновано хімізм комплексоутворення. Показано, що комплексоутворювачем є катіон Ge(OH)22+, а ліганд взаємодіє у формі ангідрооснови. Визначені хіміко-аналітичні характеристики комплексів та зазначено, що найбільш інтенсивно забарвленими та стійкими є комплекси Ge(IV) з солями 6,7-дигідрокси-2,4-дифенілбензопірилію та 6,7-дигідрокси-4-метил-2-фенілбензопірилію. Показано, що введення фенільних замісників у положення 2 і 4 бензопірілієвого фрагмента призводить до зміщення комплексоутворення в більш кислу область, підвищення стійкості продуктів взаємодії та збільшення їх молярних коефіцієнтів світлопоглинання. Із використанням солей 6,7-дигідрокси-2,4-диметилбензопірилію розроблено методику визначення Германію(IV) після його екстракційного відділення у вигляді тетрахлориду. Окрему увагу приділено дослідженню будови найбільш ефективної аналітичної форми на основі продукту взаємодії Германію(IV) з катіоном 6,7-дигідрокси-2,4-дифенілбензопірилію. Із залученням квантово-хімічних розрахунків в рамках теорії функціоналу густини запропоновано найбільш ймовірну структуру комплексу, а із залученням індексів молекулярної полярності обґрунтовано високу екстракційну спорідненість запропонованої аналітичної форми. П’ятий розділ присвячено дослідженню ініціаторів низькотемпературної міцелярної екстракції. В даному розділі наведено результати визначення констант іонізації (pKa) бензойної, 4-хлорбензойної, о-нітробензойної, 2,4-дигідроксибензойної, о-, м-, п-толуїлових та саліцилової кислот у водних розчинах та організованих середовищах на основі нейоногенної поверхнево-активної речовини Тритону Х-100 при різних концентраціях останнього в системі методом потенціометричного титрування. Показано, що на характер та ступінь зміни кислотно-основних властивостей досліджуваних сполук впливають їх природа і фізико-хімічні властивості середовища. Запропоновано критерії вибору ініціаторів міцелярної екстракції, які дозволяють проводити аналітичне концентрування за кімнатної температури. У шостому розділі висвітлено нові комбіновані спектрофотометричні (атомно-абсорбційні) методики визначення слідових кількостей Германію(IV) після його низькотемпературного міцелярно-екстракційного концентрування у вигляді комплексів з похідними 6,7-дигідроксибензопірилію. Запропоновано спектрофотометричну методику визначення Германію(IV) з 6,7-дигідрокси-2,4-дифенілбензопірилієм після його міцелярної екстракції. За оптимальних умов визначення: pH 1, вміст 6,7-дигідрокси-2,4-дифенілбензопірилію 1,8–2·10-5 моль/л, вміст ініціатору міцелярної екстракції

2. The dissertation is devoted to the study of the peculiarities of the formation of chemically induced micellar phases of non-ionic surfactants, the establishment of their extraction capacity for Ge(IV) complexes with 2,4-substituted derivatives of 6,7-dihydroxybenzopyryllium and the development of appropriate combined spectroscopic methods for its determination. The introduction substantiates the relevance of the topic of the dissertation, formulates the purpose and objectives of the research, indicates the scientific novelty and practical significance of the results obtained. The first section presents a review of the literature, systematized data of literary sources on the current state and prospects for the development of liquid extraction methods. Particular

attention is paid to cloud point extraction(CPE) concentration and corresponding modern modifications. The second section provides a description of the reagents used, the characteristics of the equipment used in the work. Methods of synthesis and identification of 6,7-dihydroxybenzopyryllium derivatives used in this work are presented. Methods, conditions and main stages of experimental research are presented. The third section is devoted to the study of solvatochromic properties of a number of derivatives of 6,7-dihydroxybenzopyryllium perchlorate: 6,7-dihydroxy-2,4-dimethylbenzopyryllium, 6,7-dihydroxy-2-phenyl-4-methylbenzopyryllium and 6,7-dihydroxy-2,4-diphenylbenzopyryllium. The influence of the nature of organic solvents was investigated on the example of methanol, ethanol, n-propanol, iso-propanol, n-butanol, iso-butanol, n-pentanol, iso-pentanol, n-hexanol, n-heptanol, n-nonanol, decanol, dimethylformamide, dimethyl sulfoxide, tetrahydrofuran, acetonitrile, butyl acetate, toluene and chloroform. It is shown that when a polar solvent is replaced by a less polar one, a bathochromic shift in the maximum absorption band of 6,7-dihydroxybenzopyryllium derivatives is observed, which corresponding to the nпл* electron transition. It was noted that there is a satisfactory correlation (R = 0,795-0,993) between the position of the maximum absorption of the dye and the values of the Hansen, Camlet-Taft parameter, donor and acceptor number according to Gutmann. The fourth section is devoted to the study of the complexation of Germanium(IV) with a number of alkyl- and phenyl- derivatives of 6,7-dihydroxybenzopyryllium. The composition of the Ge(IV):R = 1:2 complexes was established by classical spectrophotometric methods. On the basis of data collected, the chemistry of complexation is proposed. It is shown that the complexing agent is the Ge(OH)22+ cation, and the ligand interacts in the form of an anhydrobase. The chemical and analytical characteristics of the complexes were determined and it was noted that the most intensely colored and stable complexes are Ge(IV) complexes with salts of 6,7-dihydroxy-2,4-diphenylbenzopyryllium and 6,7-dihydroxy-4-methyl-2-phenylbenzopyryllium. It has been shown that the introduction of phenyl substituents in positions 2 and 4 of the benzopyryllium fragment leads to a shift of complexation to a more acidic region, an increase in the stability of interaction products and an increase in their molar coefficients of light absorption. Using 6,7-dihydroxy-2,4-dimethylbenzopyryllium salts, a method for determining Germanium(IV) after its extraction separation in the form of tetrachloride has been developed. Particular attention is paid to the study of the structure of the most effective analytical form based on the product of the interaction of Germanium(IV) with the 6,7-dihydroxy-2,4-diphenylbenzopyryllium cation. With the involvement of quantum-chemical calculations within the framework of the density functional theory, the most probable structure of the complex is proposed, and with the involvement of molecular polarity indices, the high extraction affinity of the proposed analytical form is substantiated. The fifth section is devoted to the study of the initiators of room-temperature cloud point extraction. This section presents the results of determination of ionization constants (pKa) of benzoic, 4-chlorobenzoic, o-nitrobenzoic, 2,4-dihydroxybenzoic, o-, m-, p-toluylic and salicylic acids in aqueous solutions and organized media based on the non-ionic surfactant Triton X-100 at different concentrations of the latter in the system by potentiometric titration. It is shown that the nature and degree of change in the acid-base properties of the studied compounds are influenced by their nature and physicochemical properties of the environment. Criteria for selecting initiators of cloud point extraction allowing analytical concentration at room temperature, are proposed. The sixth section covers new combined spectrophotometric (atomic absorption) methods for determining trace amounts of Germanium(IV) after its RT-CPE concentration in the form of complexes with 6,7-dihydroxybenzopyryllium derivatives.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Широке застосування технологій більш чистого виробництва та охорони навколишнього природного середовища

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Жуковецька О.М., Гузенко О.М., Снігур Д.В. (2023). Низькотемпературна аналітична міцелярна екстракція. Повідомлення 1: Протолітичні властивості кислотних ініціаторів у організованих середовищах. Вісник ОНУ. Хімія, 28(3(86)), 62–71. https://doi.org/10.18524/2304- 0947.2023.3(86).297826
- . Snigur, D., Azooz, E. A., Zhukovetska, O. M., Guzenko, O., & Mortada, W. I. (2023b). Recent innovations in cloud point extraction towards a more efficient and environmentally friendly procedure. TrAC. Trends in Analytical Chemistry, 164, 117113. https://doi.org/10.1016/j.trac.2023.117113
- Жуковецька О.М., Гузенко О.М., Марійчук Р.Т., Снігур Д.В. (2023). Комплексоутворення Ge(IV) із похідними 6,7-дигідроксибензопірилію та його VI аналітичне застосування. Journal of Chemistry and Technologies (Print), 31(3), 460–467. https://doi.org/10.15421/jchemtech.v31i3.287489 (Scopus, Q4)
- Snigur, D., Azooz, E. A., Zhukovetska, O., Guzenko, O., & Mortada, W. I. (2023). Low-density solvent-based liquid-liquid microextraction for separation of trace concentrations of different analytes. TrAC. Trends in Analytical Chemistry, 167, 117260. https://doi.org/10.1016/j.trac.2023.117260 (Scopus, Q1)
- Жуковецька О. М., Гузенко О. М., Щербакова Т. М., Снігур Д. В. (2023). Сольватохромні властивості деяких похідних перхлорату 6,7- дигідроксибензопірилію. Укр. хім. журн., 89(8), 117–126 https://doi.org/10.33609/2708-129X.89.08.2023.117-126

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0122/U00230

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гузенко Олена Михайлівна

2. Olena Guzenko

Кваліфікація: к. х. н., доцент, 02.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тимошук Олександр Сергійович

2. Oleksandr Tymoshuk

Кваліфікація: к.х.н., доцент, 02.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9812-4850

Додаткова інформація: Scopus Author ID 6504745510; Web of Science Researcher ID: M-8213-2019; https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=V8NrnOEAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бакланов Олександр Миколайович

2. Oleksandr Baklanov

Кваліфікація: д.х.н., професор, 02.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9396-5204

Додаткова інформація: https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006770360

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Марцинко Олена Едуардівна

2. Olena Martsinko

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кокшарова Тетяна Володимирівна

2. Tatiana Koksharova

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Стрельцова Олена Олексіївна
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Стрельцова Олена Олексіївна
Відповідальний за підготовку облікових документів	Лукашук Світлана Борисівна
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна