Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U101793

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Боровик Поліна Володимирівна

2. Borovyk Polina 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: 12-05-2021

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В. І. Вернадського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, м. Київ, 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 Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, м. Київ, 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 Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417383

Місцезнаходження: проспект академіка Палладіна, буд. 32/34, м. Київ, 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

Тема дисертації:

1. Синтез, будова та властивості координаційних сполук Ru(III), Rh(III), Pd(II), Pt(II) та Ag(I) з N-алілзаміщеними карботіоамідами

2. Synthesis, structures and properties of Ru(III), Rh(III), Pd(II), Pt(II) and Ag(I) coordination compounds with N-allyl-substituted carbothioamides.

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено дослідженню комплексоутворення Ru(III), Rh(III), Pd(II), Pt(II) та Ag(I) з N-алілзаміщеними карботіоамідами в розчині та 24 твердому стані, розробці методик синтезу моноядерних та полімерних сполук, вивченню молекулярної будови та фізико-хімічних і медико-біологічних властивостей ряду нових координаційних сполук. Синтезовано 82 нові комплексні сполуки. Будову 14 комплексів встановлено методом монокристального РСА. Проведено кореляцію молекулярної будови з даними ЕСП, ІЧ, ЯМР 1H, MALDI-TOF мас-спектрометрії. Вперше отримано ряд хлорид-, бромід- та йодид-вмісних n,п-хелатних комплексів Pd(II) і Pt(II). В кристалічному стані виділено комплекси в еквівалентному співвідношенні M:L 1:1 та бідентатно-хелатною координацією органічного ліганду атомами сульфуру

карботіоамідного угрупування та (C=C) зв'язком алільного фрагменту. Вперше досліджено комплексоутворення іонів Ru3+,2+, Rh3+, Pd2+ і Ag+ з гетероциклвмісними N-алілтіоамідами. Виділено в індивідуальному стані ряд нових хелатних комплексів молекулярного, катіонного та аніонного характеру, а також координаційні полімерні сполуки Ag(I) з реалізацією в їх будові полімерних ланцюгів Ag–S–Ag. Встановлено, що розчинність отриманих сполук залежить від типу комплексу: сполуки іонного типу розчиняються в метанолі, частково (або повністю) в етанолі, а в малих концентраціях (10-3 – 10-5 моль/л) – у воді, в той час як сполуки молекулярного типу розчинні тільки в ДМСО та ДМФА. Полімерні комплекси Ag(I) є нерозчинними у ДМСО та ДМФА. Вперше досліджено дію n,□-хелатних комплексів Pd(II) і Pt(II) на клітини меристем Allium сера, карциноми Льюіс та мікросфероїди молочної залози MCF-7. Показано їх ефективність як потенційних антипроліферативних, цитотоксичних та проапоптичних засобів на моделях in vitro та in vivo. Вперше досліджено взаємодію галогенідних n,□-хелатних координаційних сполук Pd(II), Pt(II) на основі 1-аліл-3-(2-гідроксиетил)тіосечовини з молекулами ДНК плазміди pTZ19R. Методом молекулярного докінгу встановлено, що дані комплекси можуть взаємодіяти з ДНК додатково ще і за допомогою водневого зв'язку між ОН групою етаноламінного фрагменту та гуанидиновим фрагментом молекули ДНК. Загальний механізм дії комплексів можна характеризувати утворенням одно- і дволанцюгових розривів ДНК плазміди.

2. The dissertation is devoted both to the study of Ru(III), Rh(III), Pd(II), Pt(II) and Ag(I) complexation with N-allyl-substituted carbothioamides in solution, and to synthesis, research of molecular structure and physicochemical and medical -biological properties of a number of novel coordination compounds. Optimal synthesis methodics have been developed and 82 novel complex compounds were isolated in the solid state. The structure of 14 complexes was established by the method of single-crystal X-ray diffraction study. The molecular structure was correlated with UV-Vis, IR, 1H NMR, MALDI-TOF mass spectrometry data. For the first time, a number of Cl-, Br- and I-containing n,□-chelate complex compounds of Pd(II) and Pt(II) were obtained. In the crystalline state, complexes in the equivalent M: L ratio and bidentate-chelate coordination of the organic ligand by sulfur atoms of the carbotioamide group and (C=C) of the allyl moiety bond were isolated. However, the study of complexation in solution showed that the interaction can take place in the molar ratio M:L=1:1, 1:2, 1:3, which is possible only under the conditions of monodentate coordination of substituted thioamides. The reactions of complexation of Ru3+,2+, Rh3+, Pd2+ and Ag+ ions with heterocycle-containing N-allylthioamides were studied for the first time. A number of novel chelating complexes of molecular, cationic and anionic character, as well as coordination polymer compounds of Ag(I) with realization of polymer chains Ag–S–Ag in their structure have been isolated in the solid state. It was found that the solubility of the obtained compounds depends on the type of complex: ionic compounds are soluble in methanol, partially (or completely) in ethanol and in small concentrations (10-3 – 10-5 mol/l) - in water, while molecular type compounds are soluble only in DMSO and DMF. Polymer complexes of Ag(I) are insoluble in DMSO and DMF. The effect of n,□-chelate complexes of Pd(II) and Pt(II) on cells of Allium cepa meristems, Lewis carcinoma and breast microspheroids MCF-7 was studied for the first time. Their effectiveness as potential antiproliferative, cytotoxic and proapoptotic agents has been shown in vitro and in vivo models. The interaction of halide n,□-chelate coordination compounds Pd(II), Pt(II) based on 1-allyl-3-(2-hydroxyethyl)thiourea with DNA molecules of plasmid pTZ19R was studied for the first time. Molecular docking has shown that these complexes can interact with DNA by addition through the hydrogen bond between the OH of the ethanolamine group and the guanidine moiety of the DNA. The general mechanism of action of the complexes can be characterized by the formation of single- and double-stranded breaks in DNA plasmid.

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. Орисик Світлана Іванівна

2. Orysyk Svitlana I.

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. Павліщук Анна Віталіївна
2. Pavlishchuk Anna V.

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 — Омельчук Анатолій Опанасович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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