

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U002846

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-08-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ по ДНУ №1138с від 20.09.2024 р.



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лагута Олександр Васильович

2. Oleksandr V. Lahuta

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Хімія

Дата захисту: 31-08-2024

Спеціальність за освітою: 102 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 08.051.083 ID 6136 Лагута О.В.

Повне найменування юридичної особи: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 72, Дніпро, Дніпровський р-н., 49045, 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: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 72, Дніпро, Дніпровський р-н., 49045, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.17.29.09

Тема дисертації:

1. Мідьорганічні дисперсії на основі π -комплексів. Синтез та властивості
2. Copper-organic dispersions based on π -complexes. Synthesis and properties

Реферат:

1. Дисертаційну роботу присвячено синтезу мідьвмісних композитів на основі малеїнатних комплексів Cu^+ , дослідженню їх будови, а також фізико-хімічних та бактерицидних властивостей. У першому розділі наведено аналітичний огляд літературних джерел, в яких розглядаються методи синтезу π -комплексів Cu^+ з ненасиченими органічними лігандами, результати дослідження будови їх молекулярних структур, виявлені властивості та сфери застосування. Показано, що на відміну від інших перехідних металів, здатних утворювати π -комплекси з формально нульвалентним центральним атомом, для міді є отриманими та охарактеризованими тільки π -комплекси Cu^+ . Існування π -комплексів атомів Cu^0 , яке має чітке теоретичне обґрунтування, наразі на практиці не підтверджено. У той же час, завдяки перспективі використання мідних нанодисперсій в медицині у якості, насамперед, бактерицидних препаратів, актуальною є проблема їх

синтезу та стабілізації. Співставний аналіз відомих і застосованих дослідниками методів синтезу π -комплексів Cu^+ (реагентно на основі прекурсорів CuCl чи CuSO_4 , або електрохімічно на основі прекурсорів Cu^0 чи CuSO_4) дозволив обрати реагентний спосіб, в рамках якого відновлення іонів Cu^{2+} у присутності органічних лігандів здійснювалось металічним цинком. У другому розділі наведена інформація про використані методи дослідження, реагенти та умови їх застосування. У третьому розділі представлені результати дослідження можливості утворення у водному розчині малеїнатних комплексів атомарної міді. З врахуванням існуючих рівноваг оптимізовані умови синтезу металоорганічної дисперсії. Встановлено, що при дії металевим цинком на іони Cu^{2+} в слабкокислих розчинах ($\text{pH} = 2$) малеїнової кислоти, утворюється продукт, склад якого залежить від мольного співвідношення реагентів. При $n(\text{Zn}) : n(\text{Cu}^{2+}) < 0,5$ виділяється тільки комплекс $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})]$, а при $n(\text{Zn}) : n(\text{Cu}^{2+}) > 0,5$ композити суміші $\{[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})] \times \text{Cu}^0, \text{ у } \text{H}_2\text{O}\}$. Утворення π -комплексу атомарної міді $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_4)]$ не зафіксоване. Рентгенодіфракційний аналіз зразків композиту показав, що в ньому відсутня фаза металевої міді, але присутня фаза нової речовини – продуктів взаємодії атомів Cu^0 з π -комплексами $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})]$. Квантово-хімічне моделювання дозволило виявити два типи термодинамічно стійких біядерних π -комплексів загального складу $[\text{Cu}_2(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})_2]$. Тип А характеризується каркасною структурою, в якій і іони Cu^+ і атоми Cu^0 утворюють π -зв'язки з sp^2 -гібридизованими атомами Карбону винільного фрагмента малеїнат-іона в рамках окремих шестичленних циклів ($-\text{Cu}-\text{C}-\text{C}=\text{O}-\text{H}-\text{O}-$). Тип В являє собою лінійне π -з'єднання гідратованого атома Купруму з карбоксильним Оксигеном малеїнат-іона. Близькість значень енергій утворення молекул А і В ($-114,39$ кДж/моль і $-127,84$ кДж/моль, відповідно) вказує на високу ймовірність їх одночасного утворення у процесі синтезу композиту $\{[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})] \times \text{Cu}^0, \text{ у } \text{H}_2\text{O}\}$. Виявлено, що за рахунок суттєво більшої гідрофільності розчинною формою при обробці композитів водою є комплекс $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})]$. Він також є і основним біоактивним компонентом, на що вказує чітка синхронність зміни розчинності композитів в інтервалі x від 0 до 1 зі зміною їх антибактеріальної дії на штами стафілококу. Відсутність π -комплексів атомарної міді $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_4)(\text{H}_2\text{O})]$ в композитах з $x > 0,5$ призводить до різкого зменшення їх бактерицидності. Це підтверджує висновок про природу біоактивної речовини, а також вказує на те, що в концентрованих за атомами Купруму композитах біоактивної нанодисперсії металу не виникає. Встановлено, що оптимальний склад мідьвмісного композиту відповідає формулі $\{[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})] \times 0,5\text{Cu}^0\}$. Ця речовина має достатньо високий рівень бактерицидності і, на відміну від комплексів $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})]$, – високу стійкість до дії атмосферного кисню у поєднанні з вологою

2. The dissertation is devoted to the synthesis of copper-containing composites based on maleate Cu^+ complexes, the study of their structure, as well as physicochemical and bactericidal properties. The first chapter provides an analytical review of literary sources, which consider the methods of synthesis of π -complexes of Cu^+ with unsaturated organic ligands, the results of studying the structure of their molecular structures, the discovered properties and areas of application. It is shown that, unlike other transition metals capable of forming π -complexes with a formally zero-valent central atom, only π -complexes of Cu^+ have been obtained and characterized for copper. The existence of π -complexes of Cu^0 atoms, which has a clear theoretical justification, has not yet been confirmed in practice. At the same time, due to the prospect of using copper nanodispersions in medicine as, first of all, bactericidal drugs, the problem of their synthesis and stabilization is urgent. A comparative analysis of known and applied methods for the synthesis of π -complexes Cu^+ (reactively based on CuCl or CuSO_4 precursors, or electrochemically based on Cu^0 or CuSO_4 precursors) made it possible to choose a reagent method in which the reduction of Cu^{2+} ions in the presence of organic ligands was carried out by metallic zinc. The second chapter provides information on the used research methods, reagents and conditions of their use. The third chapter presents the results of research into the possibility of formation of atomic copper maleate complexes in an aqueous solution. Taking into account the existing balances, the conditions for the synthesis of organometallic dispersion are optimized. It was established that when metallic zinc acts on Cu^{2+} ions in slightly acidic solutions ($\text{pH} = 2$) of maleic acid, a product is formed, the composition of which depends on the molar ratio of the reagents. When $n(\text{Zn}) : n(\text{Cu}^{2+}) < 0,5$, only the complex $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})]$ is released, and when $n(\text{Zn}) : n(\text{Cu}^{2+}) > 0,5$, composites of the mixture $\{[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})] \times \text{Cu}^0, \text{ in } \text{H}_2\text{O}\}$. The formation of a π -complex of atomic copper $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_4)]$

has not been recorded. X-ray diffraction analysis of samples of the composite showed that there is no metallic copper phase in it, but there is a phase of a new substance – products of the interaction of CuO atoms with π -complexes $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})]$. Quantum-chemical modeling made it possible to identify two types of thermodynamically stable binuclear π -complexes of the general composition $[\text{Cu}_2(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})_2]$. Type A is characterized by a framework structure in which both Cu^+ ions and CuO atoms form π -bonds with sp^2 -hybridized carbon atoms of the vinyl fragment of the maleate ion within separate six-membered cycles ($-\text{Cu}-\text{C}-\text{C}=\text{O}-\text{H}-\text{O}-$). Type B is a linear π -connection of a hydrated copper atom with a carboxyl oxygen of a maleate ion. The closeness of the formation energies of molecules A and B (-114.39 kJ/mol and -127.84 kJ/mol, respectively) indicates a high probability of their simultaneous formation during the synthesis of the composite $\{[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})] \times \text{CuO}, \text{ in } \text{H}_2\text{O}\}$. It was found that due to significantly greater hydrophilicity, the soluble form when processing composites with water is the $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})]$ complex. It is also the main bioactive component, which is indicated by the clear synchronicity of the change in the solubility of the composites in the interval x from 0 to 1 with the change in their antibacterial effect on staphylococcus strains. The absence of π -complexes of atomic copper $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_4)(\text{H}_2\text{O})]$ in composites with $x > 0.5$ leads to a sharp decrease in their bactericidal activity. This confirms the conclusion about the nature of the bioactive substance, and also indicates that bioactive metal nanodispersion does not occur in composites concentrated by copper atoms. It was established that the optimal composition of the copper-containing composite corresponds to the formula $\{[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})] \times 0.5\text{CuO}\}$. This substance has a sufficiently high level of bactericidal activity and, unlike $[\text{Cu}(\text{C}_4\text{O}_4\text{H}_3)(\text{H}_2\text{O})]$ complexes, is highly resistant to atmospheric oxygen in combination with moisture

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: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

1. Synthesis of copper composites containing maleic acid / V. F. Vargalyuk, V. A. Polonsky, Y. S. Osokin, O. V. Lahuta // Journal of Chemistry and Technologies. – 2021. – Vol. 29, No. 3. – P. 400–409. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v29i3.241965>
2. Фізико-хімічні та бактерицидні властивості мідьвмісних композитів на основі малеїнатних комплексів Cu^+ / В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський, Т. В. Скляр, Н. В. Стець, О. В. Лагута // Journal of Chemistry and Technologies. – 2023. – Vol. 31, No. 2. – P. 208–215. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v31i2.275070>
3. Особливості будови мідьвмісних композитів на основі малеїнатних комплексів Cu^+ / О. В. Лагута, В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський, О. І. Кушнерьов // Journal of Chemistry and Technologies. – 2023. – Vol. 31, No 4. – P. 727–733. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v31i4.290194>
4. Склад та термічні властивості мікропорошків, отриманих цементацією з розчинів Купрум(II) сульфату в присутності малеїнової кислоти / О. В. Лагута, С. В. Пустільник, Є. С. Осокін, В. А. Полонський, В. Ф. Варгалюк // XIX Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії. – 2021. – С. 73–78.
5. Теоретичне та експериментальне визначення термодинамічних характеристик редокс-системи $\text{Cu}^{2+}(\text{L})/\text{Cu}^+(\text{L})$ / О. В. Лагута, С. В. Пустільник, В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський // XXI Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань сучасної хімії. – 2023. – С. 70–72.
6. Антибактеріальна дія на штами стафілококу мідьвмісних композитів на основі малеїнатних комплексів Cu^+ / С. В. Пустільник, О. В. Лагута, В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський // XIV Всеукраїнська

конференція молодих вчених, студентів та аспірантів з актуальних питань хімії. – 2023. – С. 10.

- 7. Особливості будови мідьвмісних композитів на основі малеїнатних комплексів Cu^+ / О. В. Лагута, В. Ф. Варгалюк, В. А. Полонський, С. Д. Коптева // Матеріали II міжнародної наукової конференції «Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів». – 2023. – С. 13–15.
- 8. Синтез та властивості мідних композитних порошків, що містять малеїнову кислоту / С. В. Пустільнік, О. В. Лагута, В. А. Полонський, В. Ф. Варгалюк // XXIII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і Космос». – 2021. – С. 155.
- 9. Мідьорганічні мікропорошки з антибактерицидними властивостями / А. В. Іванченко, О. В. Лагута, Н. В. Стець, В. А. Полонський, В. Ф. Варгалюк // XXIV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і Космос». – 2022. – С. 144.
- 10. Синтез та властивості мідьвмісних композитів на основі малеїнатних комплексів Купруму(I) / Н. В. Стець, О. В. Лагута, В. А. Полонський, В. Ф. Варгалюк // XXV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і Космос». – 2023. – С. 239.

Наукова (науково-технічна) продукція: методи, теорії, гіпотези

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0119U100977, 0122U001464

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Варгалюк Віктор Федорович
2. Viktor F. Vargaliuk

Кваліфікація: д.х.н., професор, 02.00.05

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8160-3222

Додаткова інформація: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602592793>

Повне найменування юридичної особи: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 72, Дніпро, Дніпровський р-н., 49045, 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. Токар Андрій Володимирович

2. Andriy V. Tokar

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0374-8922

Додаткова інформація: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54893654600>

Повне найменування юридичної особи: Дніпровський державний аграрно-економічний університет

Код за ЄДРПОУ: 00493675

Місцезнаходження: вул. Сергія Єфремова, буд. 25, Дніпро, Дніпровський р-н., 49600, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Голіченко Олександр Анатолійович

2. Oleksandr A. Holichenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8888-794X

Додаткова інформація: ;<https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6506885394>

Повне найменування юридичної особи: Український державний університет науки і технологій

Код за ЄДРПОУ: 44165850

Місцезнаходження: вул. Лазаряна, буд. 2, Дніпро, Дніпровський р-н., 49010, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Аніщенко Андрій Олександрович

2. Andriy O. Anishchenko

Кваліфікація: к.х.н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-5437-9499

Додаткова інформація: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701771260>

Повне найменування юридичної особи: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 72, Дніпро, Дніпровський р-н., 49045, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гапонов Олександр Олександрович

2. Oleksandr O. Gaponov

Кваліфікація: к. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-2587-3751

Додаткова інформація: <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55395538000>

Повне найменування юридичної особи: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 72, Дніпро, Дніпровський р-н., 49045, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Пальчиков Віталій Олександрович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Пальчиков Віталій Олександрович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Чернявська Анна Юріївна

Реєстратор

УкрІНТЕІ

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна