Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U003337

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-07-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Суботін Владислав Володимирович
2. Subotin Vladyslav 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: 20-06-2019

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, будова і властивості координаційних халькогенгалогенідних сполук ренію(IV,V)

2. Synthesis, structure and properties of coordination rhenium(IV,V) chalcohalides

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена синтезу сполук ренію в рідкому халькогенгалогенідному середовищі з надлишком халькогену з отриманням в індивідуальному стані нових гомо- та гетерохалькогенгалогенідних комплексів, встановлення їх складу, будови, спектральних характеристик та каталітичних властивостей в процесах гідрування органічних сполук. Проведено реакції комплексоутворення в 44 системах для визначення факторів, що впливають на склад та структуру отриманих халькогенгалогених сполук ренію(IV,V), та виведення відповідних закономірностей Синтезовано 10 халькогенгалогенідів ренію в твердому стані та встановлено їх кристалічну структуру. Виявлено, що в середовищах синтезу з надлишком халькогена при 100оС утворюються в основному моноядерні халькогенгалогеніди ренію, в деяких випадках відбувається формування кластерних реній-халькогенідних остовів [Re3Chal4] і [Re3Chal7] трикутної будови. Підвищення температури до 200оС приводить до утворення три- і чотириядерних кластерних

халькогенгалогенідів ренію з реній-халькогенідними остовами [Re3Chal7] і [Re4Chal4]. Встановлено, що із збільшенням температури від 100оС до 200оС і концентрації селену відбувається відновлення іонів ренію з переходом електронної конфігурації із 5d0 в 5d3 стан. У хлоридних системах утворюються координаційні халькогенгалогенідні сполуки ReSCl3, ReSe4Cl6 та триядерні кластери. У бромідних - формуються тільки кластерні структури – три- і чотириядерні халькогенгалогеніди. Проведено квантово-хімічні розрахунки електронного стану комплексів ReSCl3, Re3Se3S4Br13 та Re4Se4S4Br16 в рамках теорії функціоналу густини (DFT), які підтвердили запропоновані структури синтезованих сполук та показали металевий (ReSCl3) і напівпровідниковий характер Re4Se4S4Br16. Виявлено, що структури сполук сформовані переважно системою ковалентних зв'язків і слабкими зв'язками Re–Re. Інтерпретовано дані ІЧ- та КРС- спектроскопії одержаних халькогенгалогенідів ренію з повним віднесенням смуг поглинання та КР-ліній коливань зв'язків (Re–Hal), (Re–Chal), (Re–μ3-Chal), (μ-Chal22п), (Re–Re). Показано, що продукти гідролізу синтезованих халькогенгалогенідів ренію можуть бути ефективними каталізаторами в реакціях рідкофазного гідрування хіноліну, ароматичних карбонових кислот та їх ефірів. Встановлено, що максимальні виходи (~100 %) цільових продуктів каталізу сягають при використанні як каталізатору продукту гідролізу Re3Se3S4Br13 в діапазоні температур 50-150оС та тиску 1-50 атм. протягом 1-24 год.

2. The thesis deals with systematic study of complex formation in system: a rhenium compound – a liquid chalcogen-halides medium with an excess of chalcogen, for obtaining new homo- and heterochalcohalides of Re, determination of their composition, structure, physicochemical and catalytic properties. In the dissertation the scientific-practical problem of determination of catalytic activity of chalcogen-halide compounds of rhenium in the processes of hydrogenation of organic compounds is solved. Complex formation reactions were investigated in 44 systems, 10 chalcogenhalides of rhenium were synthesized, of which 4 were obtained for the first time, and others were synthesized by methods other than those described in the literature. The method of synthesis of a new tetranuclear cluster thioselenobromide of rhenium Re4S4Se4Br16 is developed. The structure of 10 chalcogen halides of rhenium has been established. It was found that in the synthesis medium with an excess of chalcogen at 100°C, mainly mononuclear chalcohalides of rhenium are formed, in some cases, the formation of triangular cluster rhenium chalcogenide skeletons [Re3Chal4] and [Re3Chal7] occurs. An increase in temperature to 200oC results in the formation of three- and four-core cluster chalcogen halides of rhenium with rhenium chalcogenide skeletons [Re3Chal7] and [Re4Chal4]. It was determined that with increasing temperature from 100oC to 200oC and selenium concentration there is a reducing of rhenium atoms with the transition of its electronic configuration from 5d0 to 5d3 state. In chloride systems, coordination chalcohalide compounds ReSCl3, ReSe4Cl6 and trinucleus clusters are formed. In bromide only cluster structures are formed - tri- and tetranuclear chalcohalides are formed. The quantum-chemical calculations of the electronic state of the ReSCl3, Re3Se3S4Br13 and Re4Se4S4Br16 complexes within the framework of the theory of density functional (DFT) have been carried out, which confirmed the proposed structures of the synthesized compounds and showed the metal (ReSCl3) and the semiconductor nature of Re4Se4S4Br16. It was found that the structure of the compounds is formed predominantly by a system of covalent bonds and weak Re-Re bonds. The IR and Raman spectroscopic characteristics of the rhenium chalcohalides obtained, in particular, the presence of bandwidth absorption bands of (Re-Hal), (Re-Chal), (Re-μ3-Chal), (μ-Chal22п), (Re-Re). It has been shown that products of hydrolysis of synthesized rhenium chalcogen halides can be effective catalysts in reactions of liquid phase hydrogenation of quinoline, aromatic carboxylic acids and their esters. It was found that the maximum yields (~ 100%) of the products of catalysis were observed when using the hydrolysis product of Re3Se3S4Br13 as a catalyst in the range of temperatures of 50-150°C and a pressure of 1-50 atm. within 1-24 hours.

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. Волков Сергій Васильович

2. Volkov Sergiy V.

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. Неділько Сергій Андрійович

2. Nedilko Sergiy 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

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

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.