Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U101790

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. Довбій Ян Михайлович

2. Dovbii Yan M.

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 фталоціанінових комплексів цирконію(IV) та гафнію(IV) з позаплощинно координованими □ □ кетоєнольними хромофорними лігандами

2. Synthesis, structure, and properties of phthalocyanine complexes of zirconium (IV) and hafnium (IV) with out-of-plane coordinated □-ketoenol chromophore ligands

Реферат/анотація:

1. Дисертаційну роботу присвячено розробці методів функціоналізації фталоціанінових комплексів цирконію(IV) та гафнію(IV) реакцією лігандного обміну між дихлоридо- та дикарбоксилатофталоціанінатами зазначених металів і хромофорними □-кетоєнолами, а саме, конденсованими з альдегідів похідними дегідрацетової кислоти (DHA), N-алкіламіно-□-кетоєнолами та куркуміном. За оптимізованою методикою проведення реакції Кневенагеля з DHA та заміщених альдегідів було отримано ряд лігандних халконів. Виходячи з ряду конденсованих похідних DHA були отримані раніше неописані комплекси цирконію(IV) та гафнію(IV). Методами ПМР та мас- спектрометрії встановлена та доведена їх будова, уявлення про яку збігається з даними отриманими для модельної сполуки □ PcM(DHA)2. Такі комплекси містять у своєму складі

по два однакових позаплощинних ліганди, які розміщені в цис- або транс- положенні по відношенню один до одного, що обумовлено несиметричністю їх структури. Для комплексів складу PcM(curc)2 така ізомерія не характерна. Встановлено, що виходячи з N-алкіламіно-□-кетоєнолів та дикарбоксилатофталоціанінатів цирконію(IV) або гафнію(IV) можна отримати комплекси з лише одним хромофорним лігандом та карбоксилатним фрагментом, що не вдалося додатково замістити. Вперше синтезовано фталоціанінові комплекси цирконію(IV) та гафнію(IV), що мають два різних позаплощинних ліганди: N алкіламіно-□-кетоєнольний та карбоксилатний, які не вдалося замістити у вихідному дикарбоксилатофталоціанінаті. Отримано дані про хімічний склад, електронну та просторову будову синтезованих сполук методами елементного аналізу, ПМР□, ІЧ□спектроскопією, електронною спектроскопією поглинання, мас-спектрометрією, флуоресцентною спектроскопією та РСА. Показано вплив хромофорних лігандів на спектральні характеристики одержаних комплексів.

2. This work aims to develop functionalization methods of zirconium and hafnium phthalocyanine complexes by a ligand exchange reaction between dicarboxylatophthalocyaninates of these metals and □-ketoenols, condensed from aldehydes derivatives of dehydroacetic acid (DHA), N-alkyl-ketoenols, and curcumin. A series of chromophoric ligand chalcones containing various functional substituents were obtained by an optimized method of Knevenagel reaction with DHA and substituted aldehydes. Their interaction with primary alkylamines, the products of which are N-alkylamino-□-ketoenols, was studied. It was shown that the substituents in compounds are located in the trans-position to the □-ketoenol fragment of dehydroacetic acid that was proved by X-ray diffraction. 1H NMR spectra revealed that N-alkylamino-N-ketoenols in solutions are in the form of tautomeric isomers. According to the optimized synthesis method, several previously undescribed ligands containing amino- and □-ketoenol fragment with a chromophoric polymethine chain were obtained. It was shown that the different structure of ligands (denticity and the presence of coordination centers) leads to the formation of different out-of-plane coordinated complexes. Their structure has been established by 1H NMR and mass spectrometry. Complexes obtained from 8-oxyquinoline and dehydroacetic acid contain two identical appropriate ligands placed in the cis- or trans-position to each other due to the asymmetry of their structure. For complexes of the composition PcM(curc)2, such isomerism is not typical. It was found that starting from N-alkylamino-□-ketoenols and Zr or Hf dicarboxylate phthalocyaninates, complexes with only one chromophore ligand and a carboxylate fragment could be obtained, which could not be additionally substituted. Mixed-ligand phthalocyanines complexes of zirconium and hafnium were obtained for the first time with several condensed DHA derivatives. Their molecules contain an N-alkylamino-□-ketoenol ligand and a carboxylate ligand, which could not be substitute in the original dicarboxylatophthalocyaninates. Data on the chemical composition, electronic and spatial structure of the synthesized compounds were obtained by elemental analysis, 1H NMR spectroscopy, IR spectroscopy, UV-Vis spectroscopy, mass spectrometry, fluorescence spectroscopy, and X-ray diffraction analysis. The effect of chromophore ligands on the spectral characteristics of the obtained complexes was shown.

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. Черній Віктор Ярославович

2. Chernii Viktor Ya.

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. Фрицький Ігор Олегович

2. Fritsky Igor O.

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. Потаскалов Вадим Анатолійович

2. Potaskalov Vadym A.

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.