Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U004392

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-10-2008

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пенкова Лариса Володимирівна
2. Penkova Larysa Volodymyrivna

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: 27-10-2008

Спеціальність за освітою: 01.08

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.001.03

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.17.29

Тема дисертації:

1. Біядерні комплекси 3d-металів з піразолатними лігандами у моделюванні гідролітичних металоферментів

2. 3d-Metal Dinuclear Complexes with Pyrazole-Based Ligands in the Hydrolytic Metalloenzyme Modelling. - Manuscript.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена синтезу нових лігандів хелатно-місткового типу на основі 1H-піразолу з електроноакцепторними групами, дослідженню їх комплексоутворення з йонами 3d-металів, встановленню складу та визначенню констант утворення комплексів. Розроблено методики синтезу біоміметичних моделей металоензимів, за якими синтезовано 11 нових координаційних сполук. Методом рентгеноструктурного аналізу встановлено будову 10 нових сполук. Визначено взаємозв'язок між будовою та магнітною поведінкою одержаних комплексів. Одержано каталізатори реакцій гідролізу біологічно важливих субстратів пестицидів на основі поліядерних комплексів. Встановлено кінетичні параметри реакції гідролізу параоксону та 2-(оксипропіл)-п-нітрофеніл фосфату в присутності синтезованих цинквмісних модельних систем. Вперше досліджено процеси інгібіювання фосфатазної активності лужної фосфатази

піразолвмісними лігандами.

2. The thesis concerns the synthesis 3d-metal di- and trinuclear complexes with pyrazole-based symmetric and asymmetric ligands, their characterization and study of their catalytic properties, inhibition and magnetic behavior. A series of dizinc(II) dicopper(II), dinickel(II) and dimanganese(III) complexes based on pyrazolate ligands 3-[N-hydroxyethanimidoyl]-4-methyl-1H-pyrazole-5-carboxylic acid (PzOxCA), (4-Methyl-1H-pyrazole-3,5-diyl)diethanone dihydrazone (PzDHn), (4-methyl-1H-pyrazole-3,5-diyl)bis(methylmethanone) dioxime (PzDOx), (4-phenyl-1H-pyrazole-3,5-diyl)bis(phenylmethanone) dioxime (PhPzDOx) and 1H-pyrazole-3,5-dicarboxylic acid (PzDCA) has been synthesized and examined as functional models of phosphoesterases, focusing on correlations between hydrolytic activity and molecular parameters of the bimetallic core. Speciation of the various dizinc, dicopper, dinickel and dimanganese complexes in solution has been performed potentiometrically and spectrophotometrically, and the structures of 10 complexes in the solid state have been determined by X-ray crystallography. The hydrolysis of two phosphoesters, the 2-hydroxypropyl-p-nitrophenyl phosphate (HPNP) (as an RNA model) and the pesticide paraoxon-ethyl (POE) promoted by the dinuclear phosphoesterase model complexes has been studied in DMSO/buffered water (1:1) at 50 C as a function of complex concentration, substrate concentration and pH. Significant differences in hydrolytic activity of [Zn2(PzOxCA-2H)2]0, [Zn2(PzDHn-H)2]2+, [Zn2(PzDOx-H)2]2+, [Zn2(PzDCA-3H)2]2- are observed and can be attributed to molecular peculiarities. The metal array and the complex framework seem to provide a sufficient number of coordination sites for both activating the substrate and generation of the nucleophile, where the phosphate esters are preferentially bound in a bidentate bridging fashion (in case of HPNP) and in a monodentate fashion (in case of POE). Three complexes [Cu2(PzOxCA-2H)2(DMSO)(H2O)]·H2O, [Cu2(PzOxCA-2H)2 (DMSO)2]·H2O and [Cu3(PzOxCA-3H)2(Py)5] havebeen isolated. The former feature a bis(pyrazolato)-bridged dicopper core, whereas in the latter adjacent copper ions are spanned by a pyrazolate and an oximate. The presence of different species in solution depending on the pH has been demonstrated by EPR. Alterations in the protonation state are accompanied with changes in nuclearity, which cause pronounced changes in color, magnetic and EPR properties. Magnetic susceptibility measurements in the temperature range 1,7-300 K have revealed antiferromagnetic exchange coupling between copper(II), nickel(II) and manganese(III) ions in all complexes.

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. Фрицький Ігор Олегович

2. Fritsky Igor Olegovich

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. Шульгін Віктор Федорович
2. Шульгін Віктор Федорович

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. Черній Віктор Ярославович
2. Черній Віктор Ярославович

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 Слободяник Микола Семенович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Слободяник Микола Семенович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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