Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U000878

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-02-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Афанасенко Елеонора Вадимівна
2. Eleonora Afanasenko

Кваліфікація: 102

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: хімія

Дата захисту: 12-01-2023

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Сектор науки: Не застосовується

III. Відомості про дисертацію

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 05.102.2022 / ID 643

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

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

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.17.15.15, 31.21.15.09, 31.17, 31.17.29

Тема дисертації:

1. Синтез, структура, біологічна активність супрамолекулярних координаційних тартрато-, малатогерманатів, станнатів.

2. Synthesis, structure, biological activity of supramolecular coordination tartrato-, malatogermanates,stannates.

Реферат:

1. Розроблено оригінальний загальний метод поєднання есенціальних Ge(IV)/Sn(IV), «металів життя» Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) та двох типів біолігандів: хелатуючі полідентатні тартратну/малатну кислоти та бідентатні гетероциклічні 1,10-фенантролін/2,2'-біпіридин, в складі супрамолекулярних координаційних солей з комплексними 1,10-фенантроліновими/2,2'- біпіридиновими катіонами d-металів/ протонованою молекулою 1,10-фенантроліна і комплементарними їм тартрато(малато-)германатними/станнатними аніонами. Вперше синтезовано і охарактеризовано 21 нову сполуку методами РСА, елементного, термогравіметричного аналізу, ІЧ, масс-спектроскопій, методом побудови поверхонь Хіршфельда, квантово-

механічними розрахунками (DFT). Визначено вплив структурних та складових особливостей конструкційних металхелатних блоків (катіонів і аніонів) на реалізацію міжмолекулярних нековалентних взаємодій (електростатичних, водневих, стекінг) та утворення кристалічних супрамолекулярних структур. При порівнянні структур супрамолекулярних солей виявлено роль вихідних кислот у їх формуванні. Обидві кислоти – малатна та тартратна є дикарбоновими, містять одну/дві гідроксильні групи відповідно, що значно впливає на тип аніону, який вони утворюють: тартратна кислота є тетрадентатною, виконує місткову функцію і формує чотири типи димерних германатних [Ge2(OH)2(μ-Tart)2]2-, [Ge2(OH)(H2Tart)(μ-Tart)2]3-, [Ge2(OH)(HTart)(μ-Tart)2]4-, [(μ-O){Ge2(OH)(μ-Tart)2}2]4- і один тип станнатного аніону [Sn2(μ-Tart)2(H2Tart)2]4-. Потенціально тридентатна малатна кислота проявляє себе лише як бідентатний ліганд і формує подібні октаедричні аніони [Sn(HMal)2(Mal)]3- та [Ge(HMal)(Mal)2]4- незалежно від центрального атома. Встановлено, що зміна умов синтезу та особливості 1,10-фенантроліну сприяють утворенню аніону [(μ-O){Ge2(OH)(μ-Tart)2}2]4-, в якому димерні фрагменти пов'язані містковим атомом оксигену, а протонований 1,10-фенантролін виступає в якості катіона. Розташування його молекул у зовнішній сфері сполуки зумовлює наявність стекінг взаємодій між ароматичними кільцями, що підвищує біологічну активність розглянутого комплексу. Скринінг тартратогерманатів(станнатів) з 1,10-фенантроліновими катіонами Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) на прояв антимікробної активності проти 8 умовно-патогенних штамів мікроорганізмів виявив ряд по її зменшенню для тартратостаннатів з однаковими аніоном: Zn>Cu~Co>Ni>Fe. Це корелює з квантово-хімічними розрахунками, за якими [Zn(phen)3]2+ має найбільші середнє значення електростатичних потенціалів, індекс молекулярної полярності, об'єм, загальна площа поверхні. В результаті побудовано подібний ряд для тартратогерманатів залежно від складу, структури аніону, при даному катіоні: [Ge2(OH)2(μ-Tart)2]2- > [Ge2(OH)(HTart)(μ-Tart)2]4- ~ [Ge2(OH)(HTart)(μ-Tart)2]4-. Показано можливість керування активністю □-L-рамнозидаз Penicillium tardum, Penicillium restrictum, Eupenicillium erubescens та Cryptococcus albidus під дією синтезованих сполук. В залежності від штаму вони проявляють властивості інгібіторів або активаторів, ефективність яких визначається сукупністю всіх біологічно активних компонентів, гідрофільною природою аніонів, гідрофобною – катіонів і свідчить про складний механізм їх взаємодії з ензимом. Найбільш перспективні сполуки рекомендовано до подальшого практичного застосування.

2. There was developed an original general synthesis method that combines essential Ge(IV)/Sn(IV), "life metals" Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) and two types of bioligands: chelating polydentate tartaric/malic acid and bidentate heterocyclic 1,10-phenanthroline/2,2`-bipyridine as parts of the supramolecular salts with complex 1,10-phenanthroline/2,2`-bipyridine cations of 3d-metals/ protonated phenanthroline molecule and complementary tartrate(malato-)germanate/stannate anions. Totally 21 compounds were synthesized and completely characterized by the methods of X-Ray, elemental, thermogravimetric analyses, IR-, MS-spectroscopy, Hirshfeld surface analysis and density functional theory calculations (DFT). It was established that structural and compositional features of the constructional metal-chelate blocks (cations and anions) influence the realization of intermolecular noncovalent interactions (electrostatic, hydrogen, staking) and formation of the crystalline supramolecular structures. The role of the starting acid on their formation of anions has been revealed after comparing of the supramolecular salts between each other. Both acids – malic and tartaric are dicarbonic, contain one/two hydroxylic groups, respectively. This influences the type of the anion: tartratic acid is tetradental, performs a bridging function and forms four types of dimeric germanate [Ge2(OH)2(μ-Tart)2]2-, [Ge2(OH)(H2Tart)(μ-Tart)2]3-, [Ge2(OH)(HTart)(μ-Tart)2]4-, [(μ-O){Ge2(OH)(μ-Tart)2}2]4- and one type of stannate [Sn2(μ-Tart)2(H2Tart)2]4- anions. Potentially tridentate malic acid shows itself only as bidentate ligand and forms similar octahedral anions [Sn(HMal)2(Mal)]3- and [Ge(HMal)(Mal)2]4- regardless the central atom. Change in the condition of synthesis and special features of 1,10-phenanthroline promote the formation of [(μ-O){Ge2(OH)(μ-Tart)2}2]4- anion, in which dimeric fragments are connected with bridging oxygen atom and protonated 1,10-phenanthroline acts as a cation. Location of its molecules in the outer sphere causes presence of the stacking interactions between aromatic rings and increases the total biological activity of compound. The following screening of tartratogermanates (stannates) with 1,10-phenanthroline cations of Fe(II), Co(II), Ni(II),

Cu(II), Zn(II) revealed its antimicrobial activity against 8 opportunistic pathogens. Decreasing of the activity is observed in the row of tartratostannates with the similar anion: Zn>Cu~Co>Ni>Fe. This correlates with the quantum-chemical calculations in which [Zn(phen)3]2+ has the highest average value of electrostatic potentials, molecular polarity index, volume, total surface area. As a result, there was made an alike sequence of tartratogermanates that depends from the composition and structure of anion: [Ge2(OH)2(μ-Tart)2]2- > [Ge2(OH)(HTart)(μ-Tart)2]4- ~ [Ge2(OH)(HTart)(μ-Tart)2]4-.It was established that synthesized compounds can influence the activity of □-Lrhamnosidases Penicillium tardum, Penicillium restrictum, Eupenicillium erubescens and Cryptococcus albidus. Depending on the strain, they show properties of activators or inhibitors. Their effectiveness is determined by the summation of all biologically active components, hydrophilic nature of anions, hydrophobic – cations and indicates a complex mechanism of their interaction with the enzyme.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Afanasenko, E., Seifullina, I., Martsinko, E., Dyakonenko, V., Shishkina, S., Gudzenko, O., Varbanets, L. Supramolecular organization and enzyme-effector properties of double coordination salts with malatostannate/germanate(IV) anions and Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II) 1,10-phenanthroline cations. J. Molec. Str. 2023, 133996. DOI: 10.1016/j.molstruc.2022.133996 (SCOPUS)
- Afanasenko, E., Seifullina, I., Martsinko, E., Konup, L., Fizer, M., Gudzenko, O., Borzova, N. Supramolecular Salts of Fe(II)/Co(II)/Ni(II)/Cu(II)/Zn(II) 1,10- Phenanthroline Cations and Similar Complex Tartratostannate(IV) Anions: From Structural Features to Antimicrobial Activity and Enzyme Activation. ChemistrySelect. 2022, 12, e202200280. DOI: 10.1002/slct.202200280 (SCOPUS)
- Afanasenko, E., Seifullina, I., Martsinko, E., Chebanenko, E., Dyakonenko, V., Shishkina, S. Supramolecular Salts of Germanium (IV) with Tartaric Acid, Zinc and 1,10-Phenanthroline/2,2`-Bipirydine: Synthesis, Structural Features and Selective Recognition. ChemistrySelect. 2021, 6, 4028-4032. DOI: 10.1002/slct.202100363 (SCOPUS)
- Afanasenko, E., Seifullina, I., Martsinko, E., Chebanenko, E., Dyakonenko, V., Shishkina, S. Synthesis and stereochemical features of tartratostannates with complex 1,10-phenanthroline cations of Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II). Polyhedr. 2020, 187, 114625. DOI: 10.1016/j.poly.2020.114625 (SCOPUS)
- Afanasenko, E., Seifullina, I., Martsinko, E., Chebanenko, E., Dyakonenko, V., Shishkina, S. Selective Recognition of Different Tartratogermanate Anions using 1,10-phenantroline Complexes of Fe(II), Co(II), Ni(II). ChemistrySelect. 2020, 5, 2164-2167. DOI: 10.1002/slct.201904839 (SCOPUS)м

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: 0119U002195

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сейфулліна Інна Йосипівна

2. Inna Seifullina

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

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гельмбольдт Володимир Олегович

2. Volodymyr Gelmboldt

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

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010801

Місцезнаходження: Валіховський провулок, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство охорони здоров`я України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Голіченко Олександр Анатолійович

2. Oleksandr Holichenko

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

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

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:

Сектор науки: Галузевий

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Снігур Денис Васильович
2. Denys Snigur

Кваліфікація: к. х. н., доцент, 02.00.02

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Хома Руслан Євгенійович
2. Ruslan Khoma

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

Ідентифікатор ORCHID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, Одеса, 65082, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Ракитська Тетяна Леонідівна
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Ракитська Тетяна Леонідівна
Відповідальний за підготовку облікових документів	Лукашук Світлана Борисівна
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна