Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0406U000402

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-02-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Штьосер Ганна Юріївна
2. Stoesser Ganna Juriivna

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: 27-01-2006

Спеціальність за освітою: 7.070301

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): Д 08.078.01

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070758

Місцезнаходження: просп. Гагаріна, 8, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49005, 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: Український державний хіміко-технологічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02070758

Місцезнаходження: 49005, Україна, м. Дніпро, пр. Гагаріна, 8

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.17.29

Тема дисертації:

1. Комплекси алкілпіридилпохідних ізотритіондитіолів з солями перехідних металів
2. Complexes of alkylpyridyl derivatized isotrithiondithiolates with salts of transition metals

Реферат:

1. Об'єкт дослідження: фізико-хімічні властивості комплексів "м'яких" (Cu(I), Hg(II), Cd(II), Ag(I), Pd(II), Pt(II)) і "суміжних" (Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II)) кислот Льюіса з лігандами на основі dmit; кристалічна та молекулярна структура нових комплексів; механізми деяких реакцій. Метою роботи є синтез комплексів поліфункціональних лігандів на основі ізотритіондитіолу з "м'я-кими" і "суміжними" кислотами Льюіса. Методи: елементний аналіз, комплексонометрія, мас -, ІЧ -, УФ -спектроскопія, ESI (метод електроспрей іонізації), ЯМР 1H і 13C, магнітні вимірю-вання, кондуктометрія, термогравіметрія, рентгено-структур-ний аналіз, квантовохімічні розрахунки за методом DFT. В ро-боті вперше наведено синтез і результати досліджень 4-х нових лігандів і 23?х нових комплексів. За даними ІЧ-спектроскопії показано, що ліганд 1 може проявляти як бі-, так і тридентатну координацію, а ізомерний йому ліганд 2, поводиться як моно- або бідентатний; наявність атома Нітрогену в орто-положенні лігандів 1 і 3 робить їх подібними. За допомогою

РСА, встанов-лено, що нові ліганди можуть виступати як місткові. Механізми реакцій синтезу комплексів [CuCl(1)]2 і [ZnCl3(Ph3P-CH2-CH2-2Py)][MeCN] прояснено за допомогою методу ESI. Висновок щодо міцності зв'язку M?N в комплексах, підтверджено методом термогравіметричного аналізу. Аналіз електронних спектрів поглинання дозволив зробити висновок, про слабку взаємодію піридильного/триазолільного і dmit фрагментів в нових лігандах. За даними магнітних досліджень вдалось уточнити структуру комплексів Co(II) і Ni(II); зроблено висновок щодо здатності лігандів 1 і 2 до утворення, магнітновпорядкованих систем. За допомогою квантово?хімічних розрахунків вивчено вплив струк-тури лігандів на міцність утворених ними комплексів. Зроблено важливий висновок щодо способу координації лігандів і найбільш вирогідні структури комплексів в газовій фазі. Сфера використання: координаційна і супрамолекулярна хімія, галузь нанотехнологій.

2. The object of research: chemical properties of complexes "soft" (Cu(I), Hg(II), Cd(II), Ag(I), Pd(II), Pt(II)) and "hard" (Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II)) Lewis's acids with dmit based ligands; the molecular and crystals structure of new complexes; mechanisms of something reactions. Methods: elementary analyses, komplexonome-thry, mas-, IR-, UV-vis- spectroscopy, ESI, NMR 1H & 13C, mag-netic susceptibility, conductometry, thermogravymethry, X-ray, DFT. There are syntheses and results of investigations of 4 new ligands and 23 new complexes has been described in work. It is shown, ac-cording to IR-spectroscopy, that ligand 1 can possess both bi-, and tridentate coordination, and isomeric to it ligand 2, behaves as mono- or bidentate; presence of atom of nitrogen in ortho-position in ligands 1 and 3 makes their similar. It has been, by means of X-ray, that new ligands can represent it self as "bridges" ones. Reactions mechanisms of complexes synthesis [CuCl(1)]2 and [ZnCl3(Ph3P-CH2-CH2-2Py)][MeCN] have been clarificated by the help of the ESI method. The conclusion deals with durability of bond M-N in the complexes confirmed by a method of thermogravimetric analysis. The analyses of UV-spectra have been us to draw a conclusion, about weak interaction pyridyl/triazolyl and dmit fragments in new ligands. According to magnetic researches the structure of complexes Co(II) and Ni(II) have been specified; the conclusion about ability of ligands 1 and 2 to form magneto-ordered has been made. Influence of structure ligands on durability of the complexes formed by them have been investigated by means of quantum-chemical calculations. The important conclusion about way coordination of ligands and the most probable structure of complexes in a gas phase have been made. Sphere of use: coordination & Supramolekular chemistry, nanotechnologies

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. Стародуб Володимир Олександрович

2. Starodub Volodimir Oleksandrovich

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

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. Гельмбольдт Володимир Олегович
2. Гельмбольдт Володимир Олегович

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. Кокозей Володимир Миколайович
2. Кокозей Володимир Миколайович

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	Данилов Фелікс Йосипович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Данилов Фелікс Йосипович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.