

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U003167

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-09-2024

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Малоок Максим Васильович

2. Maksym V. Malook

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0006-0984-5239

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: 12-09-2024

Спеціальність за освітою: 162 Біотехнології та біоінженерія

Місце роботи здобувача: 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

III. Відомості про дисертацію

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 08.084.40

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

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

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

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31, 31.17, 31.17.29.05, 31.17.29

Тема дисертації:

1. Синтез інгібіторів нітрифікації на основі координаційних сполук Cu(II), Zn(II), Co(II), Mn(II), Fe(II)
2. Synthesis of nitrification inhibitors based on coordination compounds Cu(II), Zn(II), Co(II), Mn(II), Fe(II)

Реферат:

1. Необмежений розвиток нітрифікуючих бактерій, наприклад *Nitrosomonas* та *Nitrobacter*, спричиняє зростання швидкості нітрифікації. Вплив інгібіторів направлений на пригнічення дії цих мікроорганізмів, шляхом прямої дії по зниженню швидкості біологічних процесів. В результаті збільшується термін доступності для рослин, амонійної форми добрива. Це збільшить врожайність сільськогосподарських культур за рахунок того, що ця форма фіксується ґрунтом і не вимивається із зони досяжності кореневої системи. Додатково зменшиться екологічний ризик забруднення навколишнього середовища. Таким, чином зменшиться вимивання нітратної форми азоту, яка забруднює річкові і озерні води та зменшиться рівень накопичення її у сільськогосподарській продукції. Тому, виробництво інгібіторів нітрифікації з більшою активністю зменшить витрати на вирощування рослин та забезпечить ринок новими, більш ефективними

препаратами у майбутньому. З цією метою за розробленою методикою, синтезовано та виділено в твердому стані координаційні сполуки Cu(II), Zn(II), Co(II), Mn(II), Fe(II) з різною кількістю та співвідношенням лігандів (1:1, 2:1, 1:2, 2:2) для застосування їх, як нові інгібітори нітрифікації. Для синтезу цих комплексів було залучено кристалогідрати сульфатів металів: $\text{ZnSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$; $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$; $\text{CoSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$; $\text{MnSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$; $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$, а в якості лігандів використовувались відомі інгібітори нітрифікації – диціандіамід (DCD) та 4-аміно-1,2,4-триазол (АТС) з вмістом основної речовини не менше, як 93 і 95 % відповідно. За допомоги ІЧ-спектроскопії було виявлено та ідентифіковано структурні елементи обох лігандів. За зміщенням та активністю смуг коливання встановлено, що приєднання АТС реалізовано 1,2-координацією через атоми N1-N2 триазольного кільця. Координація металів до АТС здійснена по циклу азолу. В свою чергу, за зміщенням та зменшенням інтенсивності піків CuN підтверджено координацію DCD у комплексах Cu(II), Co(II) та Mn(II). Для комплексів Zn(II) приєднання DCD реалізовано через групу $\text{C}=\text{NH}$. Підтверджено утворення комплексів передбаченої форми для більшості речовин на основі: порівняння мас при синтезі; кінцевої маси термічного розкладання та ізотермічної витримки; визначеного вмісту металів при урахуванні 1,2-координації одного з лігандів. Виявлено також, утворення інших типів комплексів у кожній із груп. Термічний аналіз підтвердив деякі літературні дані, що стосувались розкладання лігандів та виявив унікальність утворення ZnS при розкладанні цинкових комплексів. Встановлено, що розчинність у воді та розчинах КАС-28 всіх комплексів, окрім Mn(II), нижча чим у 4-аміно-1,2,4-триазолу та диціандіаміду. Додавання КАС збільшувало розчинність речовин та забезпечувало достатню їх кількість для інгібування процесу нітрифікації. Під час роботи над дослідженням – було виявлено ряд закономірностей: збільшення біологічної активності та тривалості дії синтезованих комплексів у порівнянні з оригінальними комерційними препаратами; показано, що в залежності від частки 4-аміно-1,2,4-триазолу в комплексних сполуках спостерігається різний вплив на всі параметри нітрифікації; зменшення втрати амоній-катионів пропорційне збільшенню частки диціандіаміду. Отже, можна зробити висновок про вплив співвідношення лігандів на показники нітрифікації – на першу фазу нітрифікації діє краще комплекс із співвідношенням лігандів 1:2 (АТС:DCD), а співвідношення 2:1 у складі комплексу має кращу синергію дії на обидві фази. За цими результатами лабораторного досліджу встановлено, що серед синтезованих сполук найвищу ефективність показували речовини ENIs-2. Вони ефективніші за комерційні інгібітори нітрифікації. В результаті проведення польових досліджень, встановлено, що застосування найефективніших синтезованих речовин разом з РКД 10-34-0 та карбамідом забезпечує значну прибавку врожайності кукурудзи. ZnNIs-2 суттєво вплинула на ріст та врожайність рослин, а MnNIs-2 відносно добре на врожайність.

2. The unrestricted growth of nitrifying bacteria, such as Nitrosomonas and Nitrobacter, causes an increase in the rate of nitrification. The effect of inhibitors is aimed at inhibiting the action of these microorganisms, by directly acting to reduce the speed of biological processes. As a result, the period of availability for plants of the ammonium form of fertilizer increases. This will increase the yield of agricultural crops due to the fact that this form is fixed by the soil and is not washed out of the reach of the root system. In addition, the ecological risk of environmental pollution will decrease. In this way, leaching of the nitrate form of nitrogen, which pollutes river and lake waters, will decrease and the level of its accumulation in agricultural products will decrease. Therefore, the production of nitrification inhibitors with greater activity will reduce the cost of growing plants and provide the market with new, more effective drugs in the future. For this purpose, according to the developed methodology, coordination compounds Cu(II), Zn(II), Co(II), Mn(II), Fe(II) were synthesized and isolated in the solid state with different amounts and ratios of ligands (1:1, 2:1, 1:2, 2:2) for their use as new nitrification inhibitors. Crystal hydrates of metal sulfates were used for the synthesis of these complexes: $\text{ZnSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$; $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$; $\text{CoSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$; $\text{MnSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$; $\text{FeSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$, and well-known nitrification inhibitors – dicyandiamide (DCD) and 4-amino-1,2,4-triazole (ATC) were used as ligands with the content of the main substance at least 93 and 95 %, respectively. With the help of IR spectroscopy, the structural elements of both ligands were detected and identified. Based on the shift and activity of the vibrational bands, it was established that ATC addition is realized by 1,2-coordination through the N1-N2 atoms of the triazole ring. Coordination of metals to ATC is carried out via the azole cycle. In turn, DCD coordination in the Cu(II), Co(II) and Mn(II) complexes was confirmed by the shift and decrease in intensity of the

CuN peaks. For Zn(II) complexes, DCD addition is implemented through the C=NH group. The formation of complexes of the predicted form was confirmed for most substances on the basis of: comparison of masses during synthesis; final mass of thermal decomposition and isothermal aging; determined metal content, taking into account the 1,2-coordination of one of the ligands. The formation of other types of complexes in each of the groups was also revealed. Thermal analysis confirmed some literature data related to the decomposition of ligands and revealed the uniqueness of the formation of ZnS during the decomposition of zinc complexes. It was established that the solubility in water and KAS-28 solutions of all complexes, except for Mn(II), is lower than that of 4-amino-1,2,4-triazole and dicyandiamide. The addition of KAS increased the solubility of substances and provided a sufficient amount of them to inhibit the nitrification process. During the work on the research, a number of regularities were discovered: - increase in biological activity and duration of action of synthesized complexes in comparison with original commercial drugs; - it is shown that depending on the proportion of 4-amino-1,2,4-triazole in complex compounds, there is a different effect on all parameters of nitrification; - the decrease in the loss of ammonium cations is proportional to the increase in the proportion of dicyandiamide. Therefore, we can conclude about the influence of the ratio of ligands on nitrification indicators - the complex with the ratio of ligands 1:2 (ATC:DCD) acts better on the first phase of nitrification, and the ratio 2:1 in the composition of the complex has a better synergy of action on both phases. According to these results of the laboratory experiment, it was established that among the synthesized compounds, ENIs-2 showed the highest efficiency. They are more effective than commercial nitrification inhibitors. As a result of conducting field research, it was established that the use of the most effective synthetic substances together with RKD 10-34-0 and urea provides a significant increase in corn yield. ZnNIs-2 significantly affected plant growth and yield, and MnNIs-2 relatively well on yield.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Технологічне оновлення та розвиток агропромислового комплексу

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Preparation and properties of cobalt-containing nitrification inhibitors / M.V. Malook, O.S. Matrosov, K. Vlasenko, O.V. Kuznetsova // Journal of Chemistry and Technologies. – 2024. – Vol. 32. – No. 2. – P. 434-443. doi.org/10.15421/jchemtech.v32i2.297927.
- Малоок М.В., Матросов О.С., Рула І.В. Комплексні сполуки цинку(II) як інгібітори нітрифікації // Питання хімії та хімічної технології. – 2023. – № 6. – С. 129-139. doi.org/10.32434/0321-4095-2023-151-6-129-139.
- Нові інгібітори нітрифікації на основі комплексних сполук міді(II) / М.В. Малоок, О.С. Матросов, С.М. Крамарьов, О.В. Штеменко // Питання хімії та хімічної технології. – 2023. – № 3. – С. 94-102. doi.org/10.32434/0321-4095-2023-148-3-94-102.

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали; речовини

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту; поліпшення стану навколишнього середовища; економія матеріалів

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Матросов Олександр Сергійович

2. Oleksandr S. Matrosov

Кваліфікація: к.т.н., доц., 05.17.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8091-1378

Додаткова інформація: ;<https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=tjqW7NYAAAAJ>

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ранський Анатолій Петрович

2. Anatolii P. Ransky

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9671-3018

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Вінницький національний технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02070693

Місцезнаходження: вул. Хмельницьке шосе, буд. 95, Вінниця, Вінницький р-н., 21021, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Сектор науки: Університетський

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гельбольдт Володимир Олегович
2. Vladimir O. Gelmboldt

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8492-964X

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

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Голіченко Олександр Анатолійович
2. Oleksandr A. Golichenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8888-794X

Додаткова інформація:

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Величко Олена Валеріївна
2. Olena V. Velichko

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3719-4932

Додаткова інформація:

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

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Коваленко Ігор Леонідович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Коваленко Ігор Леонідович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Малоок Максим Васильович

Реєстратор

УкрІНТЕІ

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна