

THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN TIẾN SĨ

1. Họ và tên nghiên cứu sinh: Khuất Thị Thúy Hà
2. Giới tính: Nữ
3. Ngày sinh: 29/05/1976
4. Nơi sinh: Hà Nội
5. Quyết định công nhận nghiên cứu sinh: Số 2875/QĐ-ĐHKHTN ngày 07/8/2015 của Hiệu trưởng trường Đại học Khoa học Tự nhiên.
6. Các thay đổi trong quá trình đào tạo: Quyết định gia hạn số 5031/QĐ-ĐHKHTN ngày 29/12/2017 và số 4730/QĐ-ĐHKHTN ngày 28/12/2018 của Hiệu trưởng trường Đại học Khoa học Tự nhiên.
7. Tên đề tài luận án: Tổng hợp và nghiên cứu cấu tạo của phức chất kim loại chuyển tiếp với một số phối tử thiosemicacbazon có chứa hidrocarbon đa vòng thơm.
8. Chuyên ngành: Hóa Vô cơ
9. Mã số: 9440112.01
10. Cán bộ hướng dẫn khoa học: PGS.TS. Nguyễn Minh Hải, GS.TS. Triệu Thị Nguyệt
11. Tóm tắt các kết quả mới của luận án:
 - Tổng hợp thành công 9 phối tử thiosemicacbazon chứa nhân phát quang antraxen và pyren cùng với 28 phức chất Ni(II), Cu(I), Cu(II), Zn(II), Pd(II) của chúng.
 - Đã nghiên cứu các phối tử và phức chất bằng phương pháp phổ IR, ESI-MS, và $^1\text{H-NMR}$. Nhiều chất (5 phối tử, 22 phức chất) đã được khẳng định cấu trúc bằng phương pháp nhiễu xạ tia X đơn tinh thể.
 - Đã lý giải sự tạo thành các dạng phối trí khác nhau, ảnh hưởng của hiệu ứng không gian đến sự hình thành sản phẩm.
 - Đã nghiên cứu các đặc tính quang của phức chất qua phương pháp phổ hấp thụ điện tử và phổ phát xạ huỳnh quang.
 - Đã sử dụng phương pháp tính toán lí thuyết để hỗ trợ các phân tích trong luận án.
12. Khả năng ứng dụng thực tiễn: Các phức chất Ni(II), Pd(II) của phối tử thiosemicacbazon chứa antraxen và pyren có khả năng phát quang tốt. Do vậy, chúng có thể ứng dụng trong nhận biết các anion, hợp chất nitro thơm dễ nổ qua cơ chế tắt huỳnh quang. Ngoài ra, các phức chất chứa antraxen và pyren với hệ liên hợp mở rộng có thể tương tác với ADN qua tương tác π - π .
13. Các hướng nghiên cứu tiếp theo:
 - Nghiên cứu tương tác của các phức chất với ADN;
 - Nhận biết huỳnh quang các anion, hợp chất nitro thơm dễ nổ.
14. Các công trình công bố liên quan đến luận án:

Công bố trên tạp chí quốc tế

[1]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat, Hung-Huy Nguyen, Thi-Hien Dinh. Ni(II), Pd(II) Complexes with Pyrene-based Thiosemicarbazones: Syntheses, Molecular Structures and Excimeric Emissions. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie* **2019** 645(2), 113

[2]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat, Hung-Huy Nguyen, Quan-Manh Phung, Thi-Hien Dinh, Emissive Pd(II) thiosemicarbazones bearing anthracene: New complexes with unusual coordination mode. *Inorganic Chemistry Communications* **2019** 102, 120-125.

[3]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat, Danh-Quang Do, Hung-Huy Nguyen; Thi-Hien Dinh, Anthracene-based Ni(II) Thiosemicarbazones with Novel Intramolecular p-p Stackings. *Inorganic Chemistry Communications* **2020** 118, 107994.

Công bố trên tạp chí quốc gia

[1]. Nguyễn Minh Hải, Khuất Thị Thuý Hà. “Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc của phức chất Cu(II) với phối tử hexametilentiosemicabazon chứa hợp phần pyren”, Tạp chí Phân tích Hóa, Lý và Sinh học, 2016, 21, (4), Tr.41- 46.

[2]. Nguyễn Minh Hải, Khuất Thị Thuý Hà, Nguyễn Hùng Huy. “Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc của phức chất Zn(II) với phối tử hexametilentiosemicabazon chứa hợp phần antraxen”, Tạp chí khoa học và công nghệ -ĐHQGHN Tập 32, số 4 (2016), tr. 99-104.

[3]. Nguyễn Minh Hải, Khuất Thị Thuý Hà. “Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc của phức chất Ni(II) với phối tử 4-ethylthiosemicabazon chứa hợp phần pyren”, Tạp chí Hóa học, 2017, 55(5E1,2) 184-187.

[4]. Nguyễn Minh Hải, Khuất Thị Thuý Hà. “Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc của phức chất Pd(II) với phối tử 4-etylthiosemicabazon chứa hợp phần pyren”, Tạp chí Phân tích Hóa, Lý và Sinh học, 2017, 22, (4), Tr.134-139.

[5]. Nguyễn Minh Hải, Khuất Thị Thuý Hà. “Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc của phức chất Cu(I) với phối tử 4-etylthiosemicabazon chứa hợp phần antraxen”, Tạp chí Phân tích Hóa, Lý và Sinh học, 2018, 23, (1), Tr.114- 120.

[6]. Nguyễn Minh Hải, Nguyễn Thị Mai Hạnh, Khuất Thị Thuý Hà, “Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc của phức chất Cu(I) với phối tử 4-metylthiosemicabazon chứa hợp phần antraxen”, Tạp chí Phân tích Hóa, Lý và Sinh học, 2018, 23, (3), Tr.136-143.

[7]. Nguyễn Minh Hải, Khuất Thị Thuý Hà, “Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc của phức chất Cu(II) với phối tử 4-tetrametilen và 4- hexametilentiosemicabazon chứa hợp phần antraxen”, Tạp chí Phân tích Hóa, Lý và Sinh học, 2018, 23, (3), Tr.144-151.

[8]. Nguyễn Minh Hải, Khuất Thị Thúy Hà, “Tổng hợp và nghiên cứu cấu trúc của phức chất Ni(II) với phối tử 4-etylthiosemicacbazon và 4- phenylthiosemicacbazon chứa hợp phần antraxen”, Tạp chí Phân tích Hóa, Lý và Sinh học, 2018, 23, (3), Tr.129-135.

Ngày 3 tháng 8 năm 2021

Người hướng dẫn luận án

Nghiên cứu sinh

PGS. TS. Nguyễn Minh Hải

Khuất Thị Thúy Hà

INFORMATION ON DOCTORAL THESIS

1. Full name: Thi-Thuy-Ha Khuat
2. Sex: female
3. Date of birth: 29/05/1976
4. Place of birth: Hanoi
5. Admission decision number: Decision 2875/QD-ĐHKHTN dated 07/8/2015 of VNU University of Science.
6. Changes in academic process: Decision 5031/QD-ĐHKHTN dated 29/12/2017 and 4730/QD-ĐHKHTN dated 28/12/2018 of VNU University of Science.
7. Official thesis title: Syntheses and characterizations of transition metal complexes of thiosemicarbazone ligands bearing polycyclic aromatic hydrocarbons.
8. Major: Inorganic chemistry
9. Code: 9440112.01
10. Supervisors: Assoc. Prof. Dr. Nguyen Minh Hai, Prof. Dr. Trieu Thi Nguyet
11. Summary of the new findings of the thesis
 - Successfully synthesized 9 thiosemicarbazone ligands bearing anthracene/pyrene and 28 metal complexes of Ni(II), Cu(I), Cu(II), Zn(II), Pd(II).
 - The ligands and complexes were characterized by physical methods such as IR, ESI-MS, và $^1\text{H-NMR}$. 5 ligands and 22 complexes were structurally determined by SC-XRD.
 - Various coordination geometries and steric influence induced by substituents of thiosemicarbazone ligands were observed.
 - Photophysical properties of the ligands and complexes were studied by absorption and photoluminescence spectroscopies.
12. Practical applicability, if any: The Ni(II), Pd(II) complexes with anthracene- and pyrene-based ligands are strongly emissive. Hence, they may be used to detect anions, explosive nitro aromatic compounds via fluorescence quenching mechanism. As having large conjugated systems of anthracene and pyrene, the complexes may interact effectively with DNA via π - π stackings.
13. Further research directions, if any:
 - DNA binding study of the complexes;
 - Fluorescent sensing of anions and explosive nitro aromatic compounds.
14. Thesis-related publications:

Published in international journals

[1]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat, Hung-Huy Nguyen, Thi-Hien Dinh. Ni(II), Pd(II) Complexes with Pyrene-based Thiosemicarbazones: Syntheses, Molecular Structures

and Excimeric Emissions. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie* **2019** 645(2), 113

[2]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat, Hung-Huy Nguyen, Quan-Manh Phung, Thi-Hien Dinh, Emissive Pd(II) thiosemicarbazones bearing anthracene: New complexes with unusual coordination mode. *Inorganic Chemistry Communications* **2019** 102, 120-125.

[3]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat, Danh-Quang Do, Hung-Huy Nguyen; Thi-Hien Dinh, Anthracene-based Ni(II) Thiosemicarbazones with Novel Intramolecular p-p Stackings. *Inorganic Chemistry Communications* **2020** 118, 107994.

Published in national journals

[1]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat. "Synthesis and structural characterization of Cu(II) with hexamethylthiosemicarbazone ligand containing pyrene", *Journal of Analytical Sciences*, 2016, 21, (4), P.41- 46.

[2]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat, Hung-Huy Nguyen. "Synthesis and structural characterization of Zn(II) with hexamethylthiosemicarbazone ligand containing anthracene", *VNU Journal of Science*, Vol. 32, No. 4 (2016), p. 99-104.

[3]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat. "Synthesis and structural characterization of Ni(II) with 4-ethylthiosemicarbazone ligand containing pyrene", *VietNam Journal of Chemistry*, 2017, 55(5E1,2) 184-187.

[4]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat. "Synthesis and structural characterization of Pd(II) with 4-ethylthiosemicarbazone ligand containing pyrene", *Journal of Analytical Sciences*, 2017, 22, (4), P.134- 139.

[5]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat. "Synthesis and structural characterization of Cu(I) with 4-ethylthiosemicarbazone ligand containing anthracene", *Journal of Analytical Sciences*, 2018, 23, (1), P.114- 120.

[6]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Mai-Hanh Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat. "Synthesis and structural characterization of Cu(I) with 4-methylthiosemicarbazone ligand containing anthracene", *Journal of Analytical Sciences*, 2018, 23, (3), P.136- 143.

[7]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat. "Synthesis and structural characterization of Cu(II) with 4-tetramethylene and 4-hexamethylenethiosemicarbazone ligand containing anthracene", *Journal of Analytical Sciences*, 2018, 23, (3), P.144- 151.

[8]. Minh-Hai Nguyen, Thi-Thuy-Ha Khuat. "Synthesis and structural characterization of Ni(II) with 4-ethylthiosemicarbazone and 4-phenylthiosemicarbazone ligand containing anthracene", *Journal of Analytical Sciences*, 2018, 23, (3), P.129- 135.

Date: 3/8/2021

Supervisor

PhD Student

Assoc. Prof. Minh-Hai Nguyen

Thi-Thuy-Ha Khuat