

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0406U000140

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-01-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Павлюк Олексій Вікторович

2. Pavlyuk Oleksii Viktorovuch

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: 14-12-2005

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: 79000, м. Львів, вул. Університетська, 1

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): Д35.051.10

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: 79000, м. Львів, вул. Університетська, 1

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. Особливості утворення і будови кристалічних комплексів галогенідів Cu(I) з N-алільними онієвими солями моноазотистих ароматичних гетероциклів.
2. The peculiarities of formation and structure of crystalline Cu(I) halide complexes with onium salts of mononitrogen aromatic heterocycles.

Реферат:

1. Методом зміннострумного електрохімічного синтезу і, частково, безпосередньою взаємодією компонентів, виходячи з онієвих солей N-алільних похідних моноазотистих ароматичних гетероциклів та деяких продуктів їх перетворень отримано 23 комплексів галогенідів Cu (з них 6 – Cu(II)) і досліджено їх кристалічну структуру методом монокристалу. Виявлено особливості поведінки зв'язку C=C алільної групи щодо галогенідів Cu(I): здатність до взаємодії Cu(I)–(C=C) в досліджених комплексах пов'язана з основністю (pKa) вихідного гетероциклу. При pKa < 5.20, пі-взаємодія відсутня (комплекси Cu(I) з катионом N-алілхінолінію). При pKa ароматичної основи > 5.20 (комплекси Cu(I) з N-алілпіридинієм або N-алілізохінолінієм) відмічається ефективна взаємодія Cu(I)–(C=C). N-алілхіноліній галогеніди (хлорид, бромід та іодид) у присутності CuCN і металічної міді, в середовищі метанолу, зазнають каталітичної циклодимеризації, внаслідок чого утворюється невідомий досі пентациклічний катіон [C₂₄H₂₁N₂]⁺. На противагу цьому N-алілізохіноліній

галогеніди не здатні до такого перетворення. Ступінь ускладнення неорганічного фрагменту у структурах досліджених комплексів є наслідком конкуренції між відносно сильними взаємодіями - Cu-Hal, Cu(I)-(C=C) і слабшими — водневими зв'язками та пі-пі стекінгом.

2. By means of the alternating current electrochemical technique and, partially, by direct interaction of components, using the onium salts of N-allyl derivatives of mononitrogen heterocycles, 23 copper(I) (and some Cu(II)) halide complexes have been obtained and X-ray structurally investigated by single crystal method. It has been displayed a peculiar behavior of allyl C=C bond regarding to Cu(I) halides: an ability of Cu(I)-(C=C) interaction in the compounds is connected with the basicity of an initial heterocycle (pKa). At pKa < 5.20 any pi-interaction has not been detected (complexes with N-allylquinolinium cation). At pKa > 5.20 (complexes with N-allylpyridinium or N-allylisoquinolinium cations) effective Cu(I)-(C=C) interaction appeared. N-allylquinolinium halides (Cl-, Br-, I-) in presence of CuCN, Cu and methanol as a solvent undergo cyclic dimerization which produces unknown earlier pentacyclic [C₂₄H₂₁N₂]⁺ cation. Contrary to these, N-allylisoquinolinium halides appeared to be unable for such transformation. A complication degree of inorganic fragment in the complexes under consideration is a consequence of competition among relatively strong Cu(I)-Hal, Cu(I)-(C=C) interactions and weaker H-bonds and pi-pi-stacking.

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 ОПВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Миськів Мар'ян Григорович

2. Mys'kiv Marian Grygorovych

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. Штеменко Олександр Васильович
2. Штеменко Олександр Васильович

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. Олійник Володимир Володимирович
2. Олійник Володимир Володимирович

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**

Ковальчук Євген Прокопович

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

Ковальчук Євген Прокопович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.