

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0405U001496

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-04-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Болдог Іштван Йосипович

2. Boldog Ishtvan Josypovych

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: 28-03-2005

Спеціальність за освітою: 01.08

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

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): Д 26.001.03

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, 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: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.17, 31.17.29

Тема дисертації:

1. 4,4'-біпіразоли - нові багатофункціональні тектони у контексті кристалічної інженерії
2. 4,4'-bipyrazols, the new polyfunctional tectons in the field of crystal engineering

Реферат:

1. Дисертація присвячена синтезу і структурному дослідженню водневозв'язних асоціатів і координаційних полімерів 4,4'-біпіразолів. Досліджено NH---N самоасоціацію 4,4'-біпіразолів, показано раціональний характер структуроутворення, зокрема ряду поліморфів тетраметилбіпіразолілу, результатом якого є відтворення правильних тризв'язних сіток у тому числі принципово нецентросиметричних (10,3)-а,с. Отримано і структурно досліджено ряд асоціатів 4,4'-біпіразолів із донорами/акцепторами водневого зв'язку та солей із неорганічними аніонами - зроблено узагальнення щодо характеру водневої зв'язності, зокрема раціоналізовано способи піразол-аніонної асоціації. Синтезовано ряд координаційних полімерів 4,4'-біпіразолів із Co(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I), Cd(II) і структурно досліджено вплив таких факторів як змінний кут згину тектону, наявність NH групи біля N-донорного атому ліганду, природи аніону і гостьової молекули на метричні і топологічні властивості утворених полімерів. Показано, що запропоновані 4,4'-біпіразольні

тектони забезпечують утворення ряду нецентросиметричних і поруватих каркасів, прояву фундаментальної сіткової ізомерії, і відтворення нових або незвичайних координаційних топологій.

2. The thesis is devoted to synthesis and structural investigation of H-bonded and coordination polymers of 4,4'-bipyrazolyls, a new class of tectons in the field of crystal engineering. Known modes of the pyrazole self-assembly was used for rational design of quite regular three-connected network via inheritance of them in the structures of 4,4'-bipyrazolyls and their analogs. The original design of the tecton, represented as a flexible joint of two three-connected vertices, allows the self-assembly process to reproduce regular networks including the noncentrosymmetric (10,3)-a,c ones. A range of 3,3',5,5'-tetramethyl-4,4'-bipyrazolyl adducts were obtained in order to investigate the influence of H-bond donor/acceptor inclusion on the pyrazole self-assembly modes. The formation of helical patterns attributed to the nonplanarity of the tecton were found for a range of hydrates and the inheritance of pyrazole-like catameric patterns were stated for some new pyrazole-phenol adducts. Also, the structural role of newly observed (Pz)H---pi(Ph)OH and PhOH---pi(Pz), Pz = pyrazole, interactions were established for adducts with meta-phenols. The potential of pyrazolium cation for crystal engineering by strong H-bonds was tested through structural investigation of 4,4'-bipyrazolium salts. The formation of chain-based structures were rationalized on the basis that pyrazolium-anion interaction patterns follow a few well-defined cyclic {(Hpz)(AX₂)_{1/2}}, {(Hpz)₂A₂} modes, depending on the anion's shape and charge. The established modes are supramolecular synthon candidates, and can be used for anion dependent "chain-engineering" in the structures of pyrazolium salts. The original skew geometry of the 4,4'-bipyrazolyl as a bidentate ligand, limited flexibility of the tetramethyl substituted 4,4'-bipyrazolyl, the presence of NH group near the ligand's N-donor atoms substantiate the interest towards the coordination bonded crystal engineering of the proposed tectons. 1D, 2D, 3D coordination polymers of 4,4'-bipyrazolyls and Co(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I), Cd(II) were synthesized as crystalline solids under different conditions, including the use of different counter anions and the type of guest molecules; their structures were proven by single crystal X-ray diffraction analysis. Typical 1D and 2D coordination polymers manifest tecton caused "flexibility", which results in such a nontypical structure organization like chiral double helices, or porous, H-bonded stacking of corrugated (4,4) networks, formation of which is principally influenced by NH---A- interactions. It was clearly shown that variable angularity of the tecton could result in fundamental and rationally conditioned changes in the network topology, namely the observed cases (4,4) net "diamond net and (4,4) net "3(2)6(2) net (porous) isomerism, or reproduce a new, porous 4·4·8(8)·8(8)·8(4)·8(4) network almost in the most regular form, which is impossible for the 4,4'-bipyridyl spacer tecton.⁸⁴ Crystalline phases of H-bonded and coordination compounds of new tecton class, the 4,4'-bipyrazolyls were investigated by means of X-ray single crystal structure determination. Possible areas of application of 4,4'-bipyrazolyls were shown and new promising directions of investigation in particular towards rational design of noncentrosymmetric and porous crystalline structure were targeted.

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. Домасевич Костянтин Валентинович
2. Domasevitch Konstantin Valentinovitch

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. 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. Кальченко Віталій Іванович
2. Кальченко Віталій Іванович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03, 02.00.08

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**

Слободяник Микола Семенович

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

Слободяник Микола Семенович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.