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/анотація:

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)-a,c. 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-assemby 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 paterns were stated for some new pyrazole-phenol adducts. Also, the structural roleof 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 a 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 crystalline phases of H-bonded and coordination compounds ofnew 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 ОПІВ:

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.