

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0520U100447

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-09-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сливка Юрій Іванович

2. Slyvka Yurii Ivanovych

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор 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: 08-09-2020

Спеціальність за освітою: 102. Хімія

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

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 35.051.10

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, 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: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

Тема дисертації:

1. Структурна хімія π -комплексів Cu(I) та Ag(I) з алільними похідними азолів.
2. Structural chemistry of Cu(I) and Ag(I) π -complexes with allyl derivatives of azoles

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці синтетичних підходів, встановленню будови і основних принципів кристалічної інженерії π -комплексів купруму(I) та аргентуму(I) з алільними похідними азолів (1,2,3-триазолу, 1,2,4-триазолу, тетразолу, 1,3,4-тіадіазолу, 1,3,4-оксадіазолу), а також дослідженню нелінійно-оптичних властивостей π -координаційних сполук купруму(I) на предмет генерації другої і третьої оптичних гармонік. Методом змінно-струмного електрохімічного синтезу та безпосередньою взаємодією компонентів синтезовано і досліджено будову 107 нових координаційних сполук, серед яких 80 π -комплексів купруму(I) та 22 π -комплекси аргентуму(I) на основі 31 органічного ліганду – алільних похідних азолів. Рентгенівським методом монокристалу встановлено кристалічну будову всіх 107 координаційних сполук та 6 органічних аліл-вмісних лігандів. Кристалохімічний аналіз π -комплексів дозволив виокремити основні способи організації координаційних фрагментів (та вузлів), а також проаналізувати аспекти взаємодії Me-(C=C). Проведено низку квантово-хімічних обчислень. Для кристалів π -комплексів купруму(I) виявлено високу ефективність фотоіндукованої генерації другої та третьої оптичних гармонік.

2. The thesis is devoted to the development of synthetic approaches, crystal structure investigation and exploration of main crystal engineering features of copper(I) and silver(I) π -complexes with allylic derivatives of azoles (triazole, tetrazole, thiadiazole, oxadiazole), as well as to the investigation of their non-linear optical properties. Using the alternating-current electrochemical technique as well as by the direct reactions 107 novel coordination compounds (among which 80 copper(I) π -complexes and 22 silver(I) π -coordination compounds with allyl derivatives of azoles) have been obtained and structurally studied. 31 Organic ligands, N-, O- and S-allyl (both mono- and diallyl) derivatives of azoles (1,2,3-triazole, 1,2,4-triazole, tetrazole, 1,3,4-oxadiazole and 1,3,4-thiadiazole) were designed and synthesized. All obtained 107 coordination compounds as well as 6 organic allylic ligands (based on 1,2,3-triazole, tetrazole and 1,3,4-thiadiazole) were studied using single crystal X-ray diffraction. A thorough crystal chemical analysis of the structures of copper(I) π -complexes based on allyl derivatives of azoles allowed us to identify 55 ways of coordination constructions (and nodes) organizations, covering the range from isolated fragments with terminal anions to the polymeric frameworks. Quantum chemical DFT calculations (geometry optimization, electron structure calculation, calculations of dipole moment, hyperpolarizability and theoretical Raman and UV-VIS spectra) allowed to explain the main features of the π -complexes structures and their properties. Nonlinear optical (NLO) investigation of obtained crystalline copper(I) π -complexes revealed a high efficiency laser stimulated second harmonic generation (SHG) and third harmonic generation (THG).

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. Миськів Мар'ян Григорович

2. Myskiv 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Миськів Марян Григорович

2. Myskiv 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. Лампека Ростислав Дмитрович

2. Lampeka Rostislav D.

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. Штеменко Олександр Васильович

2. Shtemenko Oleksandr V.

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. Гельмбольдт Володимир Олегович

2. Gelmboldt Volodymyr Olegovich

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**

Каличак Ярослав Михайлович.

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

Каличак Ярослав Михайлович.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.