

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0411U006536

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-11-2011

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мончак Михайло Михайлович

2. Monchak Mykhailo Mykhailovych

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: 12-10-2011

Спеціальність за освітою: 8.070301

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): 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: 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. Стереохімія пі-комплексів купруму(I) з N-алільними похідними етилендіаміну
2. Stereochemistry of copper(I) pi-complexes with N-allyl derivatives of ethylenediamine

Реферат:

1. Методом зміннострумного електрохімічного синтезу одержано 20 раніше невідомих сполук купруму з етилендіамінієм та його N-алільними похідними, 10 з яких є пі-комплексами Cu(I) – один з N-аліл-N,N,N',N'-тетраметилетилендіамінієм ($[H+alltmen]^{2+}$), чотири з N,N'-диаліл-N,N,N',N'-тетраметилетилендіамінієм ($dalltmen^{2+}$), один з N,N,N',N'-тетраалілетилетилендіамінієм ($(H+)^{2+}tallen$), один з N,N,N,N',N'-пентаалілетилетилендіамінієм ($[H+pallen]^{2+}$), три з N,N,N,N',N',N'-гексаалілетилетилендіамінієм ($hallen^{2+}$), і з допомогою рентгеноструктурного аналізу встановлено їхню кристалічну будову. У пі-комплексах купруму(I) онієві N-алільні похідні етилендіаміну проявляють себе як місткові ліганди, координуючись до атомів купруму(I) подвійними зв'язками C=C алільних груп. В структурах цих координаційних сполук утворюються як дискретні ($[(dalltmen)0.5CuCl_2]$ та ін.), так і полімерні аніонні фрагменти (одно-, дво- та тривимірні: $[(hallen)0.5Cu_2Br_3]$, $[(H+alltmen)Cu_4Cl_6]$ та $[(dalltmen)0.5Cu_2Cl_{1.67}Br_{1.33}]$ відповідно). У комплексах купруму(I), де відсутня пі-взаємодія з атомом металу, переважно утворюються полімерні стрічки $(CuX_2)_n$, між якими розташовуються органічні катіони, сполучені з ними за рахунок зв'язків (E)H...X. Більшість пі-комплексів

купруму(I) з онієвими N-алільними похідними етилендіаміну мають комбіновану координаційно-водневозв'язану полімерну структуру. Всі досліджені сполуки за особливостями їхньої будови можна поділити на три класи: ланцюжкові, шаруваті та каркасні. Ключову роль у формуванні їхньої структури відіграє органічний ліганд. Важливу роль у структурі комплексів відіграють зв'язки (E)H...X (X = Cl, Br, ONO₂).

2. By means of the alternating-current electrochemical technique 20 new copper compounds with N-allyl derivatives of ethylenediamine have been obtained and X-ray structurally investigated, among them are 10 pi-complexes of copper(I) - one compound with N-allyl- N,N,N',N'-tetramethylethylenediammonium ($[(H+alltmen)_2]^{2+}$) - $[(H+alltmen)_2Cu_4Cl_6]$, four - with N,N'-diallyl-N,N,N',N'-tetramethylethylenediammonium ($(dalltmen)_2^{2+}$) - $[(dalltmen)_2]^{2+}Cu_4Cl_6$, $[(dalltmen)_2]^{2+}Cu_4Br_6$, $[(dalltmen)_2]^{2+}Cu_4Cl_6$, $[(dalltmen)_2]^{2+}Cu_4Br_6$, one - with N,N,N',N'-tetraallylethylenediammonium ($(H+2tallen)_2^{2+}$) - $[(H+2tallen)_2]^{2+}Cu_4Cl_6$, one - with N,N,N,N',N'-pentaallylethylenediammonium ($(H+pallen)_2^{2+}$) - $(H+pallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$, and three - with N,N,N,N',N',N'-hexaallylethylenediammonium ($(hallen)_2^{2+}$) - $(hallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$, $(hallen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$ and $(hallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$. In copper(I) pi-complexes N-allyl derivatives of ethylenediamine demonstrate a bridged behaviour: they are coordinated to the metal atoms with C=C bonds and act as mono-, di- or tetradentate ligands. Both discrete ($[(dalltmen)_2]^{2+}Cu_4Cl_6$, etc) and infinite (1D, 2D and 3D, $(hallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$, $(H+alltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$ and $(dalltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$, correspondingly) inorganic fragments are arised in these complexes. In the crystal structure of $(H+alltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$ pi-coordinated $(H+alltmen)_2^{2+}$ cations are located in cavities of two-dimensional copper(I) halide aggregate $(Cu_4Cl_6)_n$. The compounds $(dalltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$, $(dalltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$ and $(hallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$ contain binuclear $Cu_2X_4^{2-}$ anions which are connected with the ligand cations into polimeric coordination chains. In the structures of $(dalltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$, $(H+pallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$, $(hallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$ and $(hallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$ infinite inorganic chains are linked with the organic cations into two dimensional layers. Complex $(dalltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$ contains a three-dimensional copper(I)halide anion $(Cu_2X_3)_n$ with pi-coordinated cations of $(dalltmen)_2^{2+}$ in its hollows. In the structure of $[(H+2tallen)_2]^{2+}Cu_4Cl_6$ the anions are connected with $(H+2tallen)_2^{2+}$ cations into a $\{(H+2tallen)_2^{2+}Cu_4Cl_6-(H+2tallen)_2^{2+}Cu_4Cl_6\}_n$ network. Thus, bridged cations of N-allyl derivatives of ethylenediammonium act as linkers of the separate anionic copper(I) fragments. Crystal structures of copper(I) non-pi-complexes consist of infinite simple chains $(CuX_2)_n$ (or $CuBr_3$ -anions for $(H+pallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$) and N-allyl derivatives of ethylenediammonium, which are connected with H-bonds. Size of organic ligand, a type of inorganic fragment, number of Cu-(C=C)-bonds and H-contacts influence markedly on a structural design of the copper(I) pi-complexes. Compared to the mainly discrete structures of copper(I) complexes with ethylenediamine itself and its some alkyl derivatives, one-dimensional ($(dalltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$, $(hallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$, etc.), two-dimensional ($(H+alltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$, $(dalltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$, $(H+pallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$, $(hallen)_2^{2+}Cu_4Br_6$, etc.) and three-dimensional ($(dalltmen)_2^{2+}Cu_4Cl_6$, $[(H+2tallen)_2]^{2+}Cu_4Cl_6$) coordination polymers demonstrate new possibilities of Cu(I) pi-complexes crystal engineering for N-allyl derivatives of ethylenediamine. The (E)H...X bonds (X = Cl, Br, ONO₂) play a significant role in a crystal structure of the complexes. For example, in $[(H+2tallen)_2]^{2+}Cu_4Cl_6$ strong (N)H...X bonds unite structural fragments into a three-dimensional framework, and weak (C)H...X bonds fasten the bulky ligand cations. Thus, Cu-(C=C) interaction and H-bonds are two crucial factors in crystal engineering of copper(I) pi-complexes with N-allyl derivatives of ethylenediammonium, and competition between them leads to a formation of diversity of the structures discussed.

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. Домасевич Костянтин Валентинович
2. Домасевич Костянтин Валентинович

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**

Котур Богдан Ярославович

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

Котур Богдан Ярославович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.