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/анотація:

1. Методом зміннострумного електрохімічного синтезу одержано 20 раніше невідомих сполук купруму з етилендіамінєм та його N-алільними похідними, 10 з яких є пі-комплексами Cu(I) - один з N-аліл-N,N,N',N'-тетраметилетилендіамінєм ([H+alltmen]2+), чотири з N,N'-диаліл-N,N,N',N'-тетраметилетилендіамінєм (dalltmen2+), один з N,N,N',N'-тетраалілетилендіамінєм ((H+)2tallen), один з N,N,N,N',N'-пентаалілетилендіамінєм ([H+pallen]2+), три з N,N,N,N',N',N'-гексаалілетилендіамінєм (hallen2+), 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)0.5CuCl2] та ін.), так і полімерні аніонні фрагменти (одно-, дво- та тривимірні: [(hallen)0.5Cu2Br3], [(H+alltmen)Cu4Cl6] та [(dalltmen)0.5Cu2Cl1.67Br1.33] відповідно). У комплексах купруму(I), де відсутня пі-взаємодія з атомом металу, переважно утворюються полімерні стрічки (CuX2-)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+) - [(H+alltmen)Cu4Cl6], four - with N,N'-diallyl-N,N,N',N'-tetramethylethylenediammonium (dalltmen2+) - [(dalltmen)0.5Cu(NO3)2], [(dalltmen)0.5CuCl2], [(dalltmen)0.5CuCl0.72Br1.28], [(dalltmen)0.5Cu2Cl1.67Br1.33], one - with N,N,N',N'-tetraallylethylenediammonium ((H+)2tallen) - [{(H+)2tallen}0.5Cu2Cl3], one - with N,N,N,N',N'-pentaallylethylenediammonium ([H+pallen]2+) - [(H+pallen)Cu4Br6], and three - with N,N,N,N',N',N'-hexaallylethylenediammonium (hallen2+) - [(hallen)0.5CuBr2], [(hallen)0.5Cu2Br3] and [(hallen)0.5Cu2Br2.27Cl0.73]. 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)0.5CuCl2], etc) and infinite (1D, 2D and 3D, [(hallen)0.5Cu2Br3], [(H+alltmen)Cu4Cl6] and [(dalltmen)0.5Cu2Cl1.67Br1.33], correspondingly) inorganic fragments are arised in these complexes. In the crystal structure of [(H+alltmen)Cu4Cl6] pi-coordinated [H+alltmen]2+ cations are located in cavities of two-dimensional copper(I) halide aggregate (Cu4Cl62-)n. The compounds [(dalltmen)0.5CuCl2], [(dalltmen)0.5CuCl0.72Br1.28] and [(hallen)0.5CuBr2] contain binuclear Cu2X42- anions which are connected with the ligand cations into polimeric coordination chains. In the structures of [(dalltmen)0.5Cu(NO3)2], [(H+pallen)Cu4Br6], [(hallen)0.5Cu2Br2.27Cl0.73] and [(hallen)0.5Cu2Br3] infinite inorganic chains are linked with the organic cations into two dimensional layers. Complex [(dalltmen)0.5Cu2Cl1.67Br1.33] contains a three-dimensional copper(I)halide anion (Cu2X3-)n with pi-coordinated cations of dalltmen2+ in its hollows. In the structure of [{(H+)2tallen}0.5Cu2Cl3] Cu4Cl62- the anions are connected with (H+)2tallen m4-cations into a {(H+)2tallen-Cu4Cl6-(H+)2tallen-Cu4Cl6}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 (CuX2-)n (or CuBr32- anions for [H+pallen][CuBr3]) 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)0.5CuCl2], [(hallen)0.5CuBr2], etc.), two-dimensional ([(H+alltmen)Cu4Cl6], [(dalltmen)0.5Cu(NO3)2], [(H+pallen)Cu4Br6], [(hallen)0.5Cu2Br3], etc.) and three-dimensional ([(dalltmen)0.5Cu2Cl1.67Br1.33], [{(H+)2tallen}0.5Cu2Cl3]) 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}0.5Cu2Cl3] 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 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. 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.