Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0210U003544

Державний реєстраційний номер: 0108U004149

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-02-2010

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Структурна хімія та дизайн купрокомплексів алільних похідних гетероциклічних органічних сполук

Початок етапу: 01.2008

Закінчення етапу: 12.2009

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (0322) 727040

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 45.563

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Структурна хімія та дизайн купрокомплексів алільних похідних гетероциклічних органічних сполук

Назва роботи англійською:

Structure chemistry and design of copper complexes with allyl derivatives of heterocyclic organic compounds

Реферат українською:

Вперше синтезовано 17 нових кристалічних комплексів купруму(I) (та купруму(II)) з N,N,N,N',N',N'-гексаалілетилендіаміній хлоридом і бромідом, N,N,N,N',N'-пентаалілетилендіаміній бромідом, N,N,N',N'-тетраалілетилендіаміном, 1-аліл-4-піридин-2-ілпіперазином, 1-аліл-4-амінопіридиній хлоридом, 1-алілхіноліній бромідом і нітратом, 2-бутин-1,4-діолом, та 1 сіль N,N,N,N',N',N'-гексаалілетилендіаміній броміду. Проведено їх рентгеноструктурне дослідження методом монокристалу. Встановлено основні структурні особливості кристалічної будови одержаних пі-комплексів. Одержані результати і виявлені закономірності структурного дизайну будуть корисними для спеціалістів, що працюють у галузі купрокаталізу та кристалічної інженерії. Захищено 2 кандидатські дисертації. Захищено 2 магістерські та 1 дипломна роботи. Опубліковано 10 статей та 7 тез доповідей. Зроблено 7 доповідей на наукових конференціях. Науковий керівник науково-дослідної роботи у складі творчого колективу за цикл праць "Супрамолекулярна координаційна хімія" отримав у 2008 р. Державну премію в галузі науки і техніки.

Реферат англійською:

17 New crystalline copper(I) (and copper(II)) complexes with N,N,N,N',N',N'-hexaallylethylenediammonium chloride and bromide, N,N,N,N',N'-pentaallylethylenediammonium bromide, N,N,N',N'-tetraallylethylenediamine, 1-allyl-4-pyridin-2-ylpiperazine, 1-allyl-4-aminopyridinium chloride, 1-allylhynolinium bromide and nitrate, 2-butyne-1,4-diol, and 1 crystalline salt of N,N,N,N',N',N'-hexaallylethylenediammonium bromide have been synthesized. Full X-ray crystal structure characterizations have been made for all the compounds. The main structure peculiarities of the obtained pi-complexes have been depicted. Obtained results and revealed peculiarities will be impotent for specialist, employed in copper-catalytic field and crystal engineering. The 2 Ph.D. theses, 2 MS theses and 1 diploma work have been defended. 10 Articles and 7 abstracts of the contributions on scientific conferences have been published. The 7 reports have been made on the conferences. Principle investigator of this scientific work for the cycle ofworks of "Supramolecular coordination chemistry" hard-working in collective group had obtained State Reward in the Branch of Science and Engineering

Індекс УДК: 54-386, 548,736:546,561

Коди тематичних рубрик: 31.17.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Миськів Мар'ян Григорович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Пі-комплекси купруму(I) з алільними похідних гетероциклічних органічних сполук

Назва НТП англійською: Copper(I) pi-complexes with allyl derivatives of heterocyclic organic compounds

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Нові результаті доповнюють сучасні уявлення про хімію комплексів Cu(I) та взаємодію Cu(I)-(C=C). Вони також є необхідною базою для фахівців, які працюють в галузі каталізу, зокрема купрокаталізу, і займаються пошуком нових функціональних матеріалів

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: пі-Комплекси Cu(I) здавна відомі як проміжні сполуки каталітичного перетворення ненасичених вуглеводнів, які також проявляють високу стереоселективність в органічному синтезі. Поведінка одержаних купро-пі-комплексів з N-алільними похідні гетероатомних органічних сполук зумовлена винятковою участю Cu(I) у каталітичному зв'язуванні з кратним зв'язком C-C органічної речовини та утворенням інтермедіатів пі-комплексів, склад і будова яких визначає ефективність каталітичного процесу. Результати дослідження координаційної поведінки ряду N-алільних похідних гетероатомних сполук щодо пі-координації з металом використовуються фахівцями, які працюють в галузі купрокаталізу та кристалічної інженерії.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2009-2010 рр.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Львівський державний університет безпеки життєдіяльності

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Горешнник Е.А. Комплексообразование 2,4,6-триаллилокси-1,3,5-триазина с хлоридом меди (I, II). Синтез и кристаллическая структура пи-комплекса состава Cu3Cl42C3H3N3(OC3H5)3 / Е.А. Горешнник, М.Г. Мыськив // Коорд. химия. - 2008. - Т.34, №6. - С.451-455. 2. Слывка Ю.И. пи-Комплексы меди(I) с 2-бутин-1,4-диолом. Синтез и кристаллическая структура пи-комплекса (2-ampH)[CuCl2(HOCH2CCCH2OH)](2-ampH - катион 2-аминопиридиния) / Ю.И. Слывка, М.Г. Мыськив, Б.М Мыхаличко, В.Н Давыдов // Коорд. химия. - 2008. - Т8, №10. - С.626-630. 3. Павлюк А.В. Координационные соединения роданида меди(I) с N-аллилхинолинием: синтез и кристаллическая структура комплексов [C9H7N(C3H5)]Cu(SCN)2 и [C9H7N(C3H5)]Cu2(SCN)3 / А.В. Павлюк, В.В. Кинжибало, Т. Лис, М.Г. Мыськив // Коорд. химия. - 2008. - Т34, №10. - С.764-769. 4.Slyvka Yu. Copper(I) pi-complex with 2-butyne-1,4-diol. Synthesis and crystal structure of Na[CuCl2(HOCH2CCCH2OH]H2O / Yu. Slyvka, V. Kinzhybalo, T. Lis, B. Mykhalitchko, M. Mys'kiv // Z. Anorg. Allgem. Chemie. - 2008. - V.634, №.4. - P.626 628. 5. Mys'kiv M. Diallylbenzimidazolium tetrabromocuprate(II) / M. Mys'kiv, E. Goreshnik // Acta Cryst.E. - 2008. - V.E64, №8. - P.m1075. 6. Zaharko O. Tetrahedra system Cu4OCl6daca4: High-temperature manifold of molecular configurations governing low-temperature properties / O. Zaharko, J. Mesot, L.A. Salguero, R. Valenti, M. Zbiri, M. Johnson, Y. Filinchuk, B. Klemke, K. Kiefer, M.Mys'kiv, Th. Strassle, H. Mutka // Physical review B. - 2008. - V.77, №22. - P.224408 1-11. 7. Мончак М.М. Новый лиганд N,N,N,N',N',N' - гексааллилэтилендиаминий (L2+). Синтез и кристаллическая структура LBr2o2H2O и его купрокомплексов L[CuII(Br0.45Cl3.55)], L[CuI4(Br4.55Cl1.45)], L[CuI4Br6)] / М.М. Мончак, А.В. Павлюк, В.В. Кинжибало, М.Г. Мыськив // Коорд. химия. - 2009. - Т35, №6. - С.414-419. 8. Павлюк А.В. Купро(I)нитратные пи-комплексы 1-аллильных производных 4-аминопиридина и хинолина: Синтез и кристаллическая структура [(NH2C5H4N(C3H5))2Cu3Cl3(NO3)2] и [C9H7N(C3H5)Cu(NO3)2] / А.В. Павлюк, Т. Лис, М.Г. Мыськив // Коорд. химия. - 2009. - Т35, №6. - С.458-462. 9. Слывка Ю.И. пи-Комплексы меди(I) с 2-бутин-1,4-диолом. Синтез и кристаллическая структура анионного пи-комплекса (pipH2)[CuCl2(HOCH2CCCH2OH)]2oH2O ((pipH2)2+ - катион пиперазиния) / Ю.И. Слывка, В.В. Кинжибало, Т. Лис, Б.М. Мыхаличко, М.Г. Мыськив // Коорд. химия. - 2009. - Т35, №4. - С.311-315. 10. Сливка Ю. Синтез і кристалічна структура аніонного купрум(I) хлоридного пікомплексу з 2-бутин-1,4-діолом складу (4ampH)[CuCl2(HOCH2CCCH2OH)] (де 4ampH+ - амінопіридиній катіон) / Ю. Сливка, Б. Михалічко, В. Давидов // Вісник Львівського університету. Серія хім. - 2009. - Вип. 50. - С. 105-112.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Височанський Василь Степанович

Перелік осіб-виконавців

Миськів Мар'ян Григорович

Мончак Михайло Михайлович

Павлюк Олексій Вікторович

Сливка Юрій Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

