Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U000059

Державний реєстраційний номер: 0120U101622

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-01-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез, структура та нелінійно-оптичні властивості нових π-комплексів купруму(I) на основі алільних похідних біологічно важливих гетероциклічних сполук

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2022

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

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322616048

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2848.089

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез, структура та нелінійно-оптичні властивості нових π-комплексів купруму(I) на основі алільних похідних біологічно важливих гетероциклічних сполук

Назва роботи англійською:

Synthesis, structure and nonlinear optical properties of new copper(I) π-complexes based on allyl derivatives of biologically important heterocyclic compounds

Реферат українською:

Звіт про НДР: 155с., 78 рис., 33 табл., 76 джерел. АЛІЛЬНІ ПОХІДНІ, БІОЛОГІЧНО ВАЖЛИВІ ГЕТЕРОЦИКЛИ, π-КОМПЛЕКСИ, КУПРМУМ(I), КРИСТАЛІЧНПА СТРУКТУРА, НЕЛІНІЙНО-ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ, ПРОТИПУХЛИННА АКТИВНІСТЬ, СИНТЕЗ. Об'єкт дослідження: Методи синтезу, кристалічні структури π-координаційних сполук купруму(I) з N-, O- і S-алільними похідними біологічно важливих гетероциклічних сполук та їх нелінійно-оптичні властивості. Мета роботи – Метою проекту є розробка принципово нових нелінійно-оптичних матеріалів для їх потенційного застосування у моніторингу різноманітних патологічних процесів. Для досягнення зазначеної мети передбачався синтез відповідних органічних лігандів, розробка та одержання кристалів π-комплексів купруму(I), дослідження їх будови сучасними фізико-хімічними методами дослідження взаємозв'язку між будовою координаційних сполук, їх фізико-хімічними характеристиками з метою оптимізації функціональних властивостей одержаних матеріалів. Методи досліджень: синтез, ІЧ-спектроскопії ЯМР-спектроскопії, рентгеноструктурний аналіз, проведення квантово-хімічних обчислень, дослідження нелінійно-оптичних властивостей, дослідження біологічної активності. Отримані результати. Синтезовано серію аліл-вмісних органічних лігандів і на їхній основі методом змінно-струмного електрохімічного синтезу одержано монокристали π-комплексів купруму(I), як галогенідного типу так і на основі різноманітних іонних солей Cu(I): NO3–, ClO4–, CF3SO3–, NH2SO3–, SiF62– та ін. Одержано низку гетерометальних π-комплексів, зокрема вперше одержано кристали РЗЕ-вмісних π-комплексів купруму(I) на основі Eu3+, Nd3+, Pr3+. Досліджено кристалічну будову сполук, проведено квантово-хімічні обчислення щодо розрахунку низки параметрів, виявлено ефективну генерацію оптичних гармонік та встановлено перспективність використання синтезованих речовин як металопрепаратів у протипухлинній терапії.

Реферат англійською:

Report on Scientific Research: 155 p., 78 Fig., 33 Tab, 76 Ref. Keywords: ALLYL DERIVATIVES, BIOLOGICALLY IMPORTANT HETEROCYCLES, π-COMPLEXES, COPPER(I), CRYSTAL STRUCTURE, NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES, ANTI-TUMOR ACTIVITY, SYNTHESIS. Research object: Methods of synthesis, crystal structures of π-coordination compounds of copper(I) with N-, O- and S-allylic derivatives of biologically important heterocyclic compounds and their nonlinear optical properties. Purpose of the work: The purpose of the project is the development of fundamentally new nonlinear optical materials for their potential application in monitoring of different pathological processes. To achieve the goal, it was planned the synthesis of target organic ligands, the development and preparation of crystals of copper(I) π-complexes, the study of their structure and the relationship between the structure of coordination compounds and their physicochemical characteristics in order to optimize the functional properties of the obtained materials. Research methods: synthesis, IR-spectroscopy, NMR-spectroscopy, single crystal X-ray diffraction, quantum-chemical calculations, study of nonlinear optical properties, biological activity studies. The results obtained. A series of allyl-containing organic ligands was synthesized, and basis on them, single crystals of copper(I) π-complexes, both of the halide type and based on various ionic salts of Cu(I) (NO3–, ClO4–, CF3SO3–, NH2SO3–, SiF62– etc.) were obtained by the alternating current electrochemical techniques. A number of heterometallic π-complexes were obtained. Crystals of rare

earth elements-containing Cu(I) π-complexes (based on Eu3+, Nd3+, Pr3+) were obtained for the first time. The crystal structure of the compounds was studied, quantum-chemical calculations were carried out, the effective generation of optical harmonics was revealed, and the prospects of using the synthesized substances as metal-based drugs in anticancer therapy were established.

Індекс УДК: 548, 546;54-386, 661.856/.857

Коди тематичних рубрик: 31.15.17, 31.17, 31.17.29.09

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Сливка Юрій Іванович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові речовини для лазерних матеріалів та речовини з протираковою активністю, публікації.

Назва НТП англійською: New substances for laser materials and the substances with anticancer activity, publications.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали, Медичні препарати

Галузь застосування: Лазерна техніка; Медицина; Науково-дослідні та навчальні лабораторії закладів освіти, інститути та наукові установи

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Одержані зразки кристалів координаційних сполук купруму(I) виявляють ефективну генерацію другої та третьої оптичних гармонік. Одержані речовини є перспективними для металовмісних препаратів у протипухлинній терапії.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Підвищення соціально-економічного поступу України

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 03.2022

Закінчення етапу: 11.2022

Споживачі продукції:

Перспективні ринки: Український ринок та ринок країн Європи

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 Fedorchuk A. A. Cu(I) Arylsulfonate л-complexes with 3-allyl-2-thiohydantoin: the role of the weak interactions in structural organization / A. A. Fedorchuk, E. Goreshnik, Yu. I. Slyvka, M. G. Mys'kiv // Acta. Chim. Slov. – 2020. –

Vol. 67. No 4. – P. 1148–1154. https://doi.org/10.17344/acsi.2020.6045

2 Pokhodylo N. Synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis of N-(4-chlorophenyl)-5-cyclopropyl-1-(4-methoxyphenyl)-1H-1,2,3-triazole-4-carboxamide / N. Pokhodylo, Y. Slyvka, V. Pavlyuk // Acta. Cryst. Sect. E. – 2020. – Vol. E76. – P. 756–760.https://doi.org/10.1107/S2056989020005848

3 Pokhodylo N.T. One-potCuAAC synthesis of (1H-1,2,3-triazol-1-yl)methyl-1,3,4/1,2,4-oxadiazoles starting from available chloromethyl-1,3,4/1,2,4-oxadiazoles / N.T. Pokhodylo, R.D. Savka, O.Ya. Shyyyka, M.D. Obushak // J. Heterocyclic. Chem. – 2020. – Vol. 57. – P. 2969□2976. https://doi.org/10.1002/jhet.4008

4 Slyvka Yu. Synthesis, structure and computational study of 5-[(prop-2-en-1-yl)sulfanyl]-1,3,4-thiadiazol-2-amine (Pesta) and its heterometallic π,□-complex [Cu2FeCl2(Pesta)4][FeCl4] / Yu. Slyvka, V. Kinzhybalo, O. Shyyka, M. Mys'kiv // Acta. Crystalogr. Sect. C. – 2021. – Vol. C77. – P. 249–256. https://doi.org/10.1107/S2053229621004198

5 Kowalska D. A. Crystal structure and enantiomeric layer disorder of a copper(I) nitrate π-coordination compound / D. A. Kowalska, V. Kinzhybalo, Yu. I. Slyvka, M. Wołcyrz // Acta. Crystalogr. Sect. B. – 2021. – Vol. B77. – P. 241–248. https://doi.org/10.1107/S2052520621001244

6 Slyvka Yu. I. Cu(NH2SO3) π-complexes with allyl derivatives of 1,3,4-thiadizoles: synthesis and structural formation through weak interactions / Yu. I. Slyvka, E. A. Goreshnik, N. T. Pokhodylo, M. G. Mys'kiv // J. Chem. Cryst. – 2022. – Vol. 52. – P. 205–213. http://dx.doi.org/10.1007/s10870-021-00906-0

7 Slyvka Y. Syntheses and crystal structures of two copper(I)–halide π,□-coordination compounds based on 2-[(prop-2-en-1-yl)sulfanyl]pyridine / Y. Slyvka, N. T. Pokhodylo, E. Goreshnik, O. Pavlyuk, M. Mys'kiv // Acta. Crystalogr. Sect. E. – 2021. – Vol. E77. – P. 1180–1184. https://doi.org/10.1107/S2056989021011002

8 Slyvka Yu. Crystal structure, DFT-study and NLO properties of the novel copper(I) nitrate π,□-complex based on 1-allyl-3-norbornan-thiourea / Yu. Slyvka, A. A. Fedorchuk, E. Goreshnik, N. Pokhodylo, J. Jedryka, K. Ozga, M. Mys'kiv // Polyhedron. – 2022. – Vol. 1240. – P. 115545-7. https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115545

9 Slyvka Yu. Allylcytisine as a convenient scaffold for the construction of the π,□-coordination compound {Acyt(H+)}[Cu8{Acyt(H+)}Cl10] with the unusual anionic 1D-coordination polymer / Yu. Slyvka, E. Goreshnik, N. Pokhodylo, D. Morozov, M. Tupychak, M. Mys'kiv // Polyhedron. – 2022. – Vol. 224. – P. 116022. https://doi.org/10.1016/j.poly.2022.116022

10 Pavlyuk O. V. Synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis of copper(I) nitrate π-complex based on 1-(2,6-dimethylphenyl)-5-allylsulfanyl-1H-tetrazole / O. V. Pavlyuk, Yu. I. Slyvka, N. T. Pokhodylo, M. G. Mys'kiv // Vopr. Khim. Khim. Tekh. – 2021. – No. 5. – P. 84□89. http://dx.doi.org/10.32434/0321-4095-2021-138-5-84-89

11 Slyvka Yu. I. 3-Phenyl-4-(prop-2-en-1-yl)-5-[(prop-2-en-1-yl)sulfanyl]-4H-1,2,4-triazole / Yu. I. Slyvka, E. A. Goreshnik, A. M. Fedko, M. G. Mys'kiv // Molbank. – 2022. – Vol. 2022. – P. M1405. https://doi.org/10.3390/M1405

12 Slyvka Yu. Synthesis and crystal structure of a new heteroligand copper(I) π-complex [Cu8(C9H9N3)4Cl6(ClO4)2(EtOH)2] based on 1-allyl-1H-benzotriazole / Yu. Slyvka, A. Fed'ko, E. Goreshnik, M. Mys'kiv // Chem. Met. Alloys. – 2020. – Vol. 13, No 1/2. – P. 8–13. https://doi.org/10.30970/cma13.0397

13 Yanchak A. π-Coordination compound of copper(I) tetrafluoroborate with N,N-dimethyl-4-[5-(allylsulfanyl)-1H-tetrazol-1-yl]aniline: synthesis and structure characterization / A. Yanchak, H. Andrusiv, Yu. Slyvka, N. Pokhodylo, M. Mys'kiv // Visnyk of the Lviv University. Series Chemistry. – 2020. – No. 61, Pt.1. – P. 135–143. https:/doi.org/10.30970/vch.6101.135

14 Slyvka Yu. I. Synthesis, crystal structure, Hirshfeld surface analysis and quantum chemical calculations of [Cu2(C6H9N3S)2(ClO4)2] π-complex with 2-allylamino-5-methyl-1,3,4-thiadiazole / Yu. I. Slyvka, E. A. Goreshnik, N. T. Pokhodylo, M. G. Mys'kiv // Odesa National University Herald. Chemistry. – 2021. – Vol. 26, No. 1 (77) – P. 16–25. http://dx.doi.org/10.18524/2304-0947.2021.1(77).226133

15 Сливка Ю. Синтез та кристалічна структура π-комплексу купрум(I) нітрату з 1-(4-метилфеніл)-5-алілтіо-1N-тетразолом / Ю. Сливка, Н. Походило, М. Миськів // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. хім.– 2021. – Вип. 62. – С. 109–115. http://dx.doi.org/10.30970/vch.6201.109

16 Slyvka Yu. A new hybrid inorganic–organic coordination copper(I) chloride π,σ-compound [Cu4(C18H17N5OS)2Cl4]·2H2O·2C3H7OH based on N-phenyl-N'-{3-allylsulfanyl-4-amino-5-phenyl-4H-1,2,4-triazol-4-yl}urea: synthesis and structure characterization / Yu. Slyvka, A. Fed'ko, E. Goreshnik, V. Kordan, M. Mys'kiv // Chem. Met. Alloys. – 2021. – Vol. 14, No 3/4. – P. 71–75. https://doi.org/10.30970/cma14.0419

17 Сливка Ю. 1-(2,6-Диметилфеніл)-5-алілтіо-1H-тетразол та його купрум(I) тетрафлюоро-боратний π,σ-комплекс: синтез, структура та квантово-хімічні розрахунки / Ю. Сливка, Н. Походило, М. Миськів // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. хім. – 2022. – Вип. 63. С. – 106–116. (DOI: 10.30970/vch.6301.106) http://publications.lnu.edu.ua/bulletins/index.php/chemisrty/article/view/11523/11865

18 Пат. UA 147736 Україна, МПК C30B 7/12 (2006.01). Спосіб одержування монокристалів галогенідних π-комплексів Cu(I) з олефіновими алкоксилігандами / Сливка Ю. І., Павлюк О. В., Миськів М. Г.; заявник і власник Львівський національний університет імені Івана Франка. – № u2020 07963; заявл. 14.12.20; опубл. 09.06.2021, Бюл. № 23.

19 Пат. Україна UA 151612, МПК C30B 7/12 (2006.01). Спосіб одержування монокристалів РЗЕ-вмісних π-комплексів Cu(I) з алільними похідними гетероциклів / Сливка Ю. І., Павлюк О. В., Миськів М. Г.; заявник і власник Львівський національний університет імені Івана Франка. – № u2022 01242; заявл. 14.04.22; опубл. 17.08.2022, Бюл. № 33.

20 Сливка Ю. π–Комплекси Cu(I) з алільними похідними гетероциклів / Ю. Сливка, О. Павлюк, М. Миськів. – Львів: Вид. Львів. у-ту, 2022. – 135 с.

21 Andrusiv H. A. Copper π-complexes with allyl[(4,6-dimethylpyrimidin-2-yl)sulfanil]acetate: synthesis, crystal structure and NLO properties / H. A. Andrusiv, Yu. I. Slyvka, E. A. Goreshnik, M.G. Mys'kiv // III International (XIII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current chemical problems", 25-27 March 2020, Vinnytsia (Ukraine): Book of abstracts. – P. 46.

22 Yanchak A. I. Copper(I) halide coordination compounds with N-phenylurea allyl derivatives / A. I. Yanchak, Yu. I. Slyvka, E. A. Goreshnik, M. G. Mys'kiv // III International (XIII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current chemical problems", 25-27 March 2020, Vinnytsia (Ukraine): Book of abstracts. – P. 65.

23 Багнюк О. Моніторинг антинеопластичної активності in vitro новосинтезованих похідних триазолів / Багнюк О., Фінюк Н., Ключівська О., Свириденко М., Шийка О., Стойка Р. // Молодь і поступ біології: збірник тез доповідей XVI Міжнародної наукової конференції студентів і аспірантів, присвяченої 75 річниці створення біологічного факультету Львівського національного університету ім. І. Франка та 90 річниці від дня народження проф. М.П. Деркача, м. Львів, 27-29 квітня 2020 р. С. 68-69.

24 Fedorchuk A. A. Unexpected oxidative C-H alcohol functionalization of 2-thiohydantoine derivitive during electrochemically assisted CuCl π-complex formation with Fe(III)/Cu(0) source of Cu(I) / A. A. Fedorchuk, Yu. I. Slyvka, M. G. Mys'kiv // IV International (XIV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current chemical problems", 23-25 March 2021, Vinnytsia (Ukraine): Book of abstracts. – P. 70.

25 Slyvka Yu. Structural chemistry of CuX (X = CF3COO–, NO3–, ½SO42–) π,σ-complexes with some 1,2,4-triazole and 1,3,4-thiadiazole allyl derivatives / Yu. Slyvka, V. Kinzhybalo, M. Mys'kiv // "62 Konwersatorium Krystalograficzne" (Polish Crystallographic Meeting), 24-25.06.2021, Wroclaw: Book of abstracts. – P. 174–175.

26 Fedko A. M. Copper(I) chloride π-complexes with allylsulfanyl derivatives of 4-amino-5-phenyl-4H-1,2,4-triazole / A. M. Fedko, A. I. Yanchak, Yu. I. Slyvka, E. A. Goreshnik, M. G. Mys'kiv // V International (XV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current chemical problems", 22-24 March 2022, Vinnytsia (Ukraine): Book of abstracts. – P. 59.

27 Slyvka Yu. Copper(I) л,п-coordination compounds with 1-allyl-3-norbornan-thiourea and N-allylcytisine: synthesis and structural characterization / Yu. Slyvka, E. Goreshnik, N. Pokhodylo, M. Mys'kiv // "63 Konwersatorium Krystalograficzne" (Polish Crystallographic Meeting), 29.06-01.07.2022, Wroclaw: Book of abstracts. – P. 89-90.

28 Slyvka Yu. The coordination behaviours of allyl derivatives of 2-thiohydantoins regarding to copper(I) and silver(I) / Yu. Slyvka, A. Fedorchuk, M. Mys'kiv // Збірник наукових праць: XVIII Наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2021". – Львів, 31 травня – 2 червня 2021 р. – Львів: Видавництво від А до Я, 2021. – С. У1.

29 Федько А. Кристалічна інженерія л-комплексів 3,4-дифеніл-5-алілсульфаніл-1,2,4-триазолу з іонними солями Cu(I) / А. Федько, Ю. Сливка, М. Миськів // Збірник наукових праць: XVIII Наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2021". – Львів, 31 травня – 2 червня 2021 р. – Львів: Видавництво від А до Я, 2021. – С. Н1.

30 Павлюк О. Перші л-комплекси Cu(I) з алільними похідними аденіну: синтез та кристалічна структура / О. Павлюк, Ю. Сливка, Є. Горешнік, М. Миськів // Збірник наукових праць: XVIII Наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2021". – Львів, 31 травня – 2 червня 2021 р. – Львів: Видавництво від А до Я, 2021. – С. Н15.

31 Янчак А. Темплатний синтез та кристалічна структура купрум(I) бромідного л-комплексу [Cu2Br2(L)2] (де L = N-[(2Z)-5-(бромометил)-3-аліл-1,3-тіазолідин-2-іліден]анілін) / А. Янчак, Ю. Сливка, М. Миськів // Збірник наукових праць: XVIII Наукова конференція "Львівські хімічні читання п 2021". – Львів, 31 травня – 2 червня 2021 р. – Львів: Видавництво від А до Я, 2021. – С. Н14.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мельник Володимир Петрович
д. філос. н., 09.00.01

Перелік осіб-виконавців

Кордан Василь Михайлович
(к. х. н., 02.00.01)

Луба Альона Олександрівна

Ощаповський Ігор Валентинович
(к.х.н.)

Походило Назарій Тарасович
(д. х. н., 02.00.03)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Сливка Ю.І.

Телефон

+38 (068) 437-65-58

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

