Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0211U002205

Державний реєстраційний номер: 0109U002610

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-01-2011

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Пі-комплекси купруму(I) як потенційні сполуки з тривимірним каркасом

Початок етапу: 03.2009

Закінчення етапу: 12.2010

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: (032)2-74-12-62

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.): 30

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Пі-комплекси купруму(I) як потенційні сполуки з тривимірним каркасом

Назва роботи англійською:

Copper(I) pi-complexes as potentional compounds with three-dimensional frameworks

Реферат українською:

Вперше синтезовано 19 нових кристалічних комплексів купруму(I) (та частково купруму(II)) з N,N'-диалілгідразин-1,2-дикарботіоамідом, 5(алілтіо)-1-феніл-1H-тетразолом, 5-(алілтіо)-1-(4-хлорфеніл)-1H-тетразолом, N,N-диалілгексаметиленіміній хлоридом, N-алілбензотріазолом, N-аліл-N,N,N',N'-тетраметилетилендіамін хлоридом, N-аліл-5-аміно-1-феніл-1H-1,2,3-тріазол-4-карбоксамідом, N-алілморфоліном, N,N,N,N',N',N'-гексаалілетилендіаміній бромідом, N,N'-дипропаннітрилпіперазином та 3,5 диаміно-1,2,4-тріазолом. Проведено їх рентгеноструктурне дослідження методом монокристалу та для частини пі-комплексів будова структурних фрагментів підтверджена за допомогою ІЧ-спектроскопії. Встановлено особливості стереохімії одержаних пі-комплексів купруму(I). Одержані результати та виявлені закономірності будуть корисними для спеціалістів, що працюють у галузі купрокаталізу і кристалічної інженерії метало-комплексів з тривимірним каркасом. Опубліковано 5 статей та 2 тез доповідей. Зроблено 4 доповіді на наукових конференціях.

Реферат англійською:

The 19 new crystalline copper(I) (and partial copper(II)) complexes with N,N'-diallylhydrazine-1,2-dicarbothioamide, 5-(allylthio)-1-phenyl-1H-tetrazole, 5-(allylthio)-1-(4-chlorophenyl)-1H-tetrazole, N,N-diallylhexamethylenimine cation, N-allylbenzotriazole, N,N,N,N',N',N'-hexaallylethylenediamminium dication, N-allyl-5-amino-1-phenyl-1H-1,2,3-triazole-4-carboxamide, N-allylmorpholinium cation, 3,3'-piperazine-1,4-diyldipropanenitrile, N-allyl-N,N,N',N'tetramethylethylene-diamminium cation and 3,5-diamine-3H-1,2,4-triazole have been synthesized. Full X-ray crystal structure characterizations have been made for all the compounds and the configuration of the structural fragment have been confirmed by the IR-spectra for selected pi-comlexes. The main stereochemichal peculierities of the obtained pi-complexes have been depicted. Obtained results and revealed peculiarities will be suitable for specialists, employed in copper-catalytic field and crystal engineering. 5 Articles and 2 abstracts of the contributions at scientific conferences have been published. The 4 reports have been made at the conferences.

Індекс УДК: 546;54-386, УДК 546;548;548.736:546.561

Коди тематичних рубрик: 31.17

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: Комплекси купруму(I) з алільними похідними гетероатомних органічних сполук

Назва НТП англійською: Complexes of copper(I) with allyl derivatives of heteroatomic organic compounds

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Нові результати 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: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2010 р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Ін-т фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка НАН України м.Донецьк

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

Статті: 1.Мончак М. Синтез і кристалічна будова пі-комплексу [(N,N,N,N',N'N'-гексаалілетилендіаміній)Cu2Br4 / М. Мончак, Є. Горешник, М. Миськів // Вісник Львівського університету. Серія хім. -2009. -Вип. 50. -С. 36 43. 2.Slyvka Yu. Copper(I) pi-complexes with 5-(allylthio)-1-(4-chlorophenyl)-1H-tetrazole. Synthesis and crystal structure of [Cu2(C10H9ClN4S)2(H2O)2](NO3)2?C2H5OH and [Cu3(C10H9ClN4S)Cl3] picompounds / Yu. Slyvka, N. Pokhodylo, R. Savka, E. Goreshnik, Z. Mazej, M. Mys'kiv // Chem. Met. Alloys. -2009. -Vol. 2, No 3/4. -С. 130 137. 3.Slyvka Yu. Copper(I) Complexes with 5-(allylthio)-1H-tetrazoles: Synthesis and Crystal Structure of [Cu2(C10H10N4S)2(H2O)2](BF4)2 and [Cu2(C10H9ClN4S)2(H2O)2](BF4)2 C2H5OH pi-Compounds / Yu. Slyvka, N. Pokhodylo, R. Savka, Z. Mazej, M. Mys'kiv, E. Goreshnik // Chem. Met. Alloys. - 2009. -Vol. 2, No 3/4. -С. 130 137. 4.Мончак М.М. Комплексы галогенидов меди(I) с этилендиаминием (L0(H+)2), N,N,N',N'-тетрааллилэтилендиаминием (L4(H+)2) и N,N,N,N',N'-пентааллилэтилендиаминием (L5(H+)). Синтез и строение кристаллических соединений [L0(H+)2]0.5CuCl2, [L0(H+)2]0.5CuBr1.67Cl0.33, [{L4(H+)2}0.5Cu2Cl3] и [(L5(H+))Cu4Br6]/ М.М. Мончак, А.В. Павлюк, В.В. Кинжибало, В.В. Глухый, М.Г. Мыськив // Коорд. химия. - 2010. - -Т. 36, № 3. - Р. 200- 205. 5.Goreshnik Evgeny Copper(I) hexafluorosilicate pi-complex with Nallylmorpholinium cation: a rare case of (C=C + 3O) copper(I) coordination in the structure of [Cu(C4H8ONH(C3H5)(H2O)2]SiF6?H2O / Evgeny Goreshnik, Marian Mys'kiv // J. Chem. Crystallogr. - 2010. - Vol. 40, No 4. - P. 381-383. Тези: 1.Сливка Ю. Пі-комплекси купруму(I) з N/S-алільними похідними триазолу та тетразолу / Ю. Сливка, Н. Походило, Р. Савка, В. Давидов // XII Наук. конфер. "Львівські хімічні читання - 2009" : Збірник наук. праць, 1 4 червня 2009 р. Львів: Вид. центр Львів. у-ту, 2009. С. Н60. 2.Yu. Slyvka Coordination Behavior of Tetrazole Core in Copper(I) and Silver(I) -Complexes with 5(Allylthio)-1-phenyl-1H-tetrazoles / Yu. Slyvka, N. Pokhodylo, R. Savka and E. Goreshnik // 3 International Summer School "Supramolecular Systems in Chemistry and Biology" : Abstracts, September 6-10, 2010. Lviv: Ed. Triada Plus, Lviv, 2010. P. 160.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Вакарчук Іван Олександрович

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

