Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0212U004213

Державний реєстраційний номер: 0110U001371

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-01-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Стереохімія пі -комплексів Cu(I) і Ag(I) з N-алільними гетероатомними лігандами

Початок етапу: 01.2010

Закінчення етапу: 12.2011

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, молоді та спорту 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.): 51.081

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Стереохімія пі-комплексів Cu(I) і Ag(I) з N-алільними гетероатомними лігандами

Назва роботи англійською:

Crystal chemistry of Cu(I) and Ag(I) pi-complexes with N-allyl derivatives of heteroatomic ligands

Реферат українською:

Вперше синтезовано та досліджено кристалічну структуру 19 нових кристалічних сполук купруму(I) (/купруму(II)) та аргентуму(I) з N,N'-диаліл-N,N,N',N'-тетраметилетилендіаміній катіоном (dalltmen2+), N,N,N',N'-тетраметилетилендіаміном (tmen), N,N,N',N'-тетрааалілетилендіаміном (tallen), N,N,N,N',N'-пентаалілетилендіаміній катіоном (pallen+), N,N'-диаллілпіперазином (daap), N-алілоксібензотріазолом (aobt), 1,3,5-триаліл-1,3,5-тріазин-2,4,6-тріоном (tratato), 5-(алілтіо)-1-(4-хлорфеніл)-1H-тетразолом (atcpt), 5-(алілтіо)-1-феніл-1H-тетразолом (atpt), N-метилгексаметилентетраміній катіоном (hmtm+) та 2-бутин-1,4-діолом (btd). Проведено їх рентгеноструктурне дослідження методом монокристалу. Встановлено основні структурні особливості кристалічної будови одержаних -комплексів. Одержані результати та виявлені закономірності будуть корисними для спеціалістів, що працюють у галузі купрокаталізу та кристалічної інженерії. Захищено 1 кандидатську дисертацію. Захищено 4 магістерські роботи. Опубліковано 9 статей та 8 тез доповідей. Зроблено 8 доповідей на наукових конференціях.

Реферат англійською:

The 19 new crystalline copper(I) (and copper(II)) and silver(I) complexes with N,N'-diallyl-N,N,N',N'-tetramethylethylenediammonium cation, N,N,N',N'-tetramethylethylenediamine, N,N,N',N'-tetraallylethylenediamine, N,N,N,N',N'-pentaallylethylenediammonium cation, N,N'-diallylpiperazine, N-allyloxybenzotriazole, 1,3,5-triallyl-1,3,5-triazine-2,4,6-trione, 5-(Allylthio)-1-(4-chlorophenyl)-1H-tetrazole, 5-(Allylthio)-1-phenyl-1H-tetrazole, N-methylhexamethylenetetraminium, 2-butyne-1,4-diol 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 important for specialist, employed in copper-catalytic field and crystal engineering. The 1 Ph.D. theses, 4 MS theses have been defended. 9 Articles and 8 abstracts of the contributions at scientific conferences have been published. 8 reports have been made at the conferences.

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: Методики одержання пі-комплексів Cu(I) і Ag(I) з N-алільними гетероатомними лігандами

Назва НТП англійською: Preparation techniques of Cu(I) and Ag(I) pi-complexes with N-allyl derivatives of heteroatomic ligands

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.10.1 Дослідження і розробки в галузі природничих наук

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 пі-комплексів Cu(I) та Ag(I) з N-алільними похідні гетероатомних органічних сполук зумовлена винятковою участю Me(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: 2012

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

Статті: 1. 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. 2. Нощенко А. В. Координационное поведенные 1,4-диаллилпиперазина 1-аллилоксибензотриазола относительно нитрата серебра в кристаллических комплексах Ag2(C4H8N2(C3H5)2(H+)2)(H2O)2(NO3)2](NO3)2 и [Ag(C6H4N3(OC3H5)(NO3)] / А. В. Нощенко, Ю. И. Слывка, А. В. Павлюк, М. Г. Мыськив // Коорд. хим. 2010. Т. 36, № 8. С. 589 594. 3. Zaharko O. Spin density distribution in the tetragonal cluster compound Cu4OCl6daca4. / O. Zaharko, P. J. Brown, M. Mys'kiv // Phys. Rev. B. - 2010. - V. 81. - P. 172405- 1- 172405- 4. 4. Goreshnik E. A. Synthesis, crystal structure and Raman spectra of AgBF4C3O3(NC3H5)3H2O, a silver(I) pi-complex with 1,3,5-triallyloxy-1,3,5-triazine-2,4,6-trione. / E. A. Goreshnik, 4. Z. Mazej, M. G. Mys'kiv // J. Organomet. Chem. - 2010. - V. 695, N 19-20. - P. 2201-2204. 5. Слывка Ю. И. Влияние природы внешнесферного катиона на архитектуру кристаллических -комплексов Ca[CuCl2(HOCH2CCCH2OH)]2 4H2O и (C7H5N2H2)[CuCl2(HOCH2CCCH2OH)] / Ю. И. Слывка, В. В. Кинжибало, Т. Лис, Б. М. Мыхаличко, М. Г. Мыськив // Журн. структ. химии. 2010. Т. 51, № 4. С. 711 717. 6. Мончак М.М. Комплексы галогенидов меди(I) с N,N'-диаллил-N,N,N',N'-тетраметилэтилендиаминием (L2+). Синтез и кристаллическая структура соединений [L0.5CuCl2], [L0.5CuCl0.72Br1.28] и [L0.5CuBr2] / М.М. Мончак, Е.А. Горешник, М.Г. Мыськив // Коорд. химия. - 2011. -Т.37, №2. - С. 145-150. 7. Slyvka Yu. First Silver(I) pi-Complexes with tetrazole allyl derivatives. Synthesis and Crystal Structure of [Ag2(C10H10N4S)2(H2O)2](BF4)2 and [Ag(C10H9ClN4S)(NO3)] pi-Compounds // Acta. Chim. Slov. 2011. Vol. 58. P. 134 138. 8. Goreshnik E.A. The first example of a direct Cu+SiF62- bond. Synthesis and crystal structure of two closely related copper(I) hexafluorosilicate pi-complexes with 1-allylbenzotriazole of [Cu2(C6H4N3(C3H5))2(H2O)2SiF6]·H2O and [Cu2(C6H4N3(C3H5))2(H2O)2]·SiF6 / E.A. Goreshnik , Yu.I. Slyvka , M.G. Mys'kiv // Inorg. Chim. Acta. 2011. Vol. 377. P.177-180. 9. Павлюк О. Синтез та кристалічна структура комплексу [N-метилгексаметилентетраміній]AgCl2 / О. Павлюк, Є. Горешнік // Вісник Львівського університету. Серія хім. - 2011. - Вип. 52. - С. 107-113. Тези: 1. Мончак М. Кристалічна інженерія купро-пі-комплексів N-алільних похідних етилендіаміну / М. Мончак, М. Миськів // XIII наук. конфер. "Львівські хімічні читання - 2011" : Збірник наук праць, 28 травня 1 червня 2011 р. Львів: Вид. центр Львів. у-ту, 2011. С. У51. 2. Ардан Б. Координаційна поведінка 1,3-бензотіазол-2-аміну та 3-аліл-1,3-бензотвазол-2(3H)-іміну у структурах комплексів купруму(I) / Б.Ардан, Ю. Сливка, Є. Горешнік, М. Миськів // XIII наук. конфер. "Львівські хімічні читання - 2011" : Збірник наук праць, 28 травня 1 червня 2011 р. Львів: Вид. центр Львів. у-ту, 2011. С. Н2. 3. Сливка Ю. пі-Комплекси аргентуму(I) з N/S-алільними похідними 1(/2)Н-тетразолу / Ю. Сливка, О. Павлюк, Н. Походило, Р. Савка, Є. Горешнік // XIII наук. конфер. "Львівські хімічні читання - 2011" : Збірник наук праць, 28 травня 1 червня 2011 р. Львів: Вид. центр Львів. у-ту, 2011. С. Н69. 4. Лук'янов М. Перші пі-комплекси іонних солей CuX і AgX (X=BF4 , ClO4) з N-аліламінонітрилами: синтез і структура / М. Лук'янов, О. Павлюк, Є. Горешнік, М. Миськів // XIII наук. конфер. "Львівські хімічні читання - 2011" : Збірник наук праць, 28 травня 1 червня 2011 р. Львів: Вид. центр Львів. у-ту, 2011. С. Н40. 5. Goreshnik E.A. Unpresendent coordination behavior of 1- and 2-allylbenzotriazoles in copper(I) pi-complexes / E.A. Goreshnik, Yu.I. Slyvka, Z. Mazej, M.G. Mys'kiv // XVIII Українська конференція з неорганічної хімії: Збірник наук праць, 27 червня - 1 липня 2011. Харків, 2011. 6. Лук'янов М.Ю. Особливості утворення і будова комплексів N-алільних похідних амінопропаннітрилу з галогенідами Cu(I) / М.Ю. Лук'янов, О.В. Павлюк, М.Г. Миськів // XVIII Українська конференція з неорганічної хімії: Збірник наук праць, 27 червня - 1 липня 2011. Харків, 2011. 7. Monchak M. M. Ethylenediamine: Unique bridging function of its N-di- and N-poly- allyl derivatives in structural design of copper(I) halide pi-complexes / M. M. Monchak, E. A. Goreshnik, M. G. Mys'kiv // 3-rd International Summer School "Supramolecular systems in chemistry an biology": Book of abstarcts, 6-10 Sept. 2010, Lviv. P. 122. Lukyanov M. New aspect of N-allyquinolinium cation catalytic trasformation / M. Lukyanov, O. Pavlyuk // 3-rd International Summer School "Supramolecular systems in chemistry an biology": Book of abstarcts, 6-10 Sept. 2010, Lviv. P. 112.

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

