Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U002092

Державний реєстраційний номер: 0120U102028

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-02-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Керований синтез, будова та властивості купрумвмісних гомо- та гетерометальних сполук для оптоелектроніки

Початок етапу: 04.2020

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, буд. 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: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 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.): 1029.178

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Керований синтез, будова та властивості купрумвмісних гомо- та гетерометальних сполук для оптоелектроніки

Назва роботи англійською:

Controlled synthesis, structure and properties of copper-containing homo- and heterometallic compounds for optoelectronics

Реферат українською:

Звіт про НДР: 129 с., 22 рис., 73 табл., 65 джерел. АЛІЛЬНІ ПОХІДНІ, АДЕНІН, БЕНЗІМІДАЗОЛИ, БЕНЗОТРІАЗОЛИ, КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА, ПІРИДИНИ, СЕЧОВИНА, ТІОГІДАНТОЇН, ТІОДІАЗОЛИ, ТІОМОРФОЛІН, ТЕТРАЗОЛИ. Об'єкт дослідження: Об'єктом дослідження є особливості процесу утворення та закономірності будови комплексних гомо- та гетерометальних купрумвмісних сполук з алілзаміщеними органічними лігандами. Мета роботи – встановлення закономірностей «склад-структура-властивості» для нових купрумвмісних гомо- та гетерометальних сполук. Методи досліджень: рентгенівськими методами монокристалу та порошку, УФ/Вид-, ІЧ-спектроскопії, ЯМР-спектроскопії. Отримані результати. Вперше синтезовано низку органічних лігандів (на основі тіогідантоїну, тетразолу, аденіну, триазолу, ціанопіридину, бензотріазолу, бензімідазолу, тіоморфоліну тощо) та добуто 19 нових кристалічних комплексів на основі купруму (або РЗЕ). Для 20 сполук здійснена повна розшифровка та уточнення моделі кристалічної структури рентгенівським методом монокристалу. Встановлено основні структурні особливості кристалічної будови одержаних сполук. Одержані результати та виявлені закономірності будуть корисними для спеціалістів, що працюють у галузі купрокаталізу та кристалічної інженерії. Захищено одну дисертацію доктора хімічних наук. Захищено три магістерські роботи. Опубліковано 16 статей, 2 патенти, 1 монографію.

Реферат англійською:

Report on the scientific project: 129 pages, 22 figures, 73 tables, 65 sources. ALLYL DERIVATIVES, ADENINE, BENZIMIDAZOLES, BENZOTRIAZOLES, CRYSTAL STRUCTURE, PYRIDINES, UREA, THIOHYDANTOIN, THIODIAZOLES, THIOMORPHOLINE, TETRAZOLES. Object of the study: the peculiarities of formation and crystal structure of homo- and heterometallic copper-containing compounds with allyl-substituted organic ligands. The purpose of the work is to establish the regularities of "composition-structure-properties" for new copper-containing homo- and heterometallic compounds. Research methods: single crystal and powder X-ray diffraction, UV/Vis-, IR-, NMR spectroscopy. For the first time, a number of organic ligands (based on thiohydantoin, tetrazole, adenine, triazole, cyanopyridine, benzotriazole, benzimidazole, thiomorpholine, etc.) were synthesized and 19 new crystalline complexes based on copper (or REE) were obtained. For 20 compounds, a complete solving and refinement of the crystal structure model was carried out using the single crystal X-ray method. The main features of the crystal structure of the obtained compounds were established. The obtained information will be useful for specialists working in the field of cuprocatalysis and crystal engineering. One dissertation of the Doctor of Chemical Sciences was defended. Three master's theses have been defended, 16 articles, 2 patents, 1 monograph were published.

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

Коди тематичних рубрик: 31.17, 31.17.29.09, 31.15.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Павлюк Олексій Вікторович

Науковий ступінь: к. х. н.

Вчене звання:доц.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Зразки координаційних сполук

Назва НТП англійською: The samples of coordination compounds

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Науково-дослідні та навчальні лабораторії закладів освіти, інститути та наукові установи хімічної промисловості тощо.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Отримано зразки координаційних сполук. Встановлено кристалічну структуру

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Економія енергоресурсів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

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

Fedorchuk A. Cu(I) arylsulfonate π-complexes with 3-allyl-2-thiohydantoin: the role of the weak interactions in structural organization / A. Fedorchuk, E. Goreshnik, Y. Slyvka, M. Mys'kiv // Acta Chim. Slov. – 2020. – V. 67, №.

4. – P. 1148–1154. DOI: 10.17344/acsi.2020.6045

Kowalska D.A. Crystal structure and enantiomeric layer disorder of a copper(I) nitrate π-coordination compound / D.A. Kowalska, V. Kinzhybalo, Y.I. Slyvka, M. Wołcyrz // Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater. – 2021. – V. 77, №. 2. – P. 241–248. DOI: 10.1107/S2052520621001244

Slyvka Y. Syntheses and crystal structures of two copper(I)–halide π,σ-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 Cryst. E. – 2021. – V. 77, №. 11. – P. 1180–1184. DOI: 10.1107/S2056989021011002

Łyszczek R. New coordination polymers of selected lanthanides with 1,2-phenylenediacetate linker: structures, thermal and luminescence properties / R. Łyszczek, I. Rusinek, A. Ostasz, J. Sienkiewicz-Gromiuk, D. Vlasyuk, M. Groszek, A. Lipke, O. Pavlyuk // Materials (Basel). – 2021. – V. 14, №. 17. – P. 4871. DOI: 10.3390/ma14174871

Pavlyuk O.V. Synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis of copper(I) nitrate pi-complex based on 1-(2,6-dimethylphenyl)-5-allylsulfanyl-1H-tetrazole / O.V. Pavlyuk, Y.I. Slyvka, N.T. Pokhodylo, M.G. Mys'kiv // Vopr. Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2021. – №. 5. – P. 84–89. DOI: 10.32434/0321-4095-2021-138-5-84-89

Pavlyuk O. V. 6-Amino-3-(prop-2-en-1-yl)-9H-purin-3-ium Tetracopper(I) Hexabromide: Synthesis and X-ray Structure Determination / O.V. Pavlyuk, Y.I. Slyvka, E.A. Goreshnik, M.G. Mys'kiv // Molbank. – 2022. – V. 2022, №. 3. – P. M1401. DOI: 10.3390/M1401

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

Slyvka Y.I. 3-Phenyl-4-(prop-2-en-1-yl)-5-[(prop-2-en-1-yl)sulfanyl]-4H-1,2,4-triazole / Y.I. Slyvka, E.A. Goreshnik, A.M. Fedko, M.G. Mys'kiv // Molbank. – 2022. – V. 2022, №. 3. – P. M1405. DOI: 10.3390/M1405

Павлюк О. Синтез та кристалічна структура купро(I)галогенідних комплексів з катіоном 1-аліл-4-ціанопіридинію. / О. Павлюк, М. Миськів, Є. Горешнік // Вісник Львів. у-ту. Сер. хім. – 2020. – V. 61, №. 1. – С. 125–134. DOI: 10.30970/vch.6101.125

Slyvka Y. 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 / Y. Slyvka, A. Fed'ko, E. Goreshnil, M. Mys'kiv // Chem. Met. Alloy. – 2020. – V. 13, №. 1/2. – P. 8–13. DOI: 10.30970/cma13.0397

Павлюк О. Синтез та кристалічна структура купройодидного комплексу з 1-аліл-1Н-бензімідазолом складу [(C7H5N2(C3H5))4Cu4I4] / О. Павлюк, М. Миськів, Є. Горешнік // Вісник Львів. у-ту. Сер. хім. – 2021. – V. 62, №. 1. – С. 116–126. DOI: 10.30970/vch.6201.116

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. – V. 62. – С. 109–115. DOI: 10.30970/vch.6201.109

Slyvka Y.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 / Y.I. Slyvka, E.A. Goreshnik, N.T. Pokhodylo, M.G. Mys'kiv // Odesa Natl. Univ. Herald. Chem. – 2021. – V. 26, №. 1(77). – С. 16–25. DOI: 10.18524/2304-0947.2021.1(77).226133

Луба А. Купрум(I) галогенідні комплекси з N,N'-диалілтіоморфоліній хлоридом: синтез та кристалічна структура / А. Луба, О. Павлюк, Є. Горешнік, A. Luba, O. Pavlyuk, E. Goreshnik // Вісник Львів. у-ту. Сер. хім. – 2022. – V. 63, №. 63. – С. 96–105. DOI: 10.30970/vch.6301.096

Сливка Ю. 1-(2,6-Диметилфеніл)-5-алілтіо-1Н-тетразол та його купрум(I) тетрафлуороборатний π,σ-комплекс: синтез, структура та квантово-хімічні розрахунки / Ю. Сливка, Н. Походило, М. Миськів // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. хім. – 2022. – V. 63. – P. 106–116. DOI: 10.30970/vch.6301.106

Slyvka Y. 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 / Y. Slyvka, A. Fed'ko, E. Goreshnik, V. Kordan, M. Mys'kiv // Chem. Met. Alloy. – 2021. – V. 14, № 3/4. – P. 71–75

Пат. UA 147736 Україна, МПКС30В 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.

Пат. UA 151612, МПК С30В 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. – № 151612; заявл. 14.04.22; опубл. 17.08.2022, Бюл. № 33/

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мельник Володимир Петрович
д. філ. н., 13.00.02, 13.00.04

Перелік осіб-виконавців

Зелінський Анатолій Вікторович
(к. х. н., 02.00.01)

Луба Альона Олександрівна

Павлюк Олексій Вікторович
(к. х. н., 02.00.01)

Сливка Юрій Іванович
(д. х. н., 102)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Павлюк Олексій Вікторович

Телефон

+38 (067) 765-20-12

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

