# Реєстраційна картка ДіР

## I. Загальні відомості

**Державний реєстраційний номер:** 0120U101622

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 13-03-2020

## II. Підстава для проведення робіт

**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

| **У тому числі по роках:** | |
|---|---|
| 2020 | 900 тис. грн. |
| 2021 | 945 тис. грн. |
| 2022 | 990 тис. грн. |
| **Загальний обсяг фінансування:** 2835 тис. грн. | |

## III. 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

## IV. 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

## V. Відомості про співвиконавця ДіР

## VI. 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

### Мета роботи українською:

Метою роботи є розробка принципово нових нелінійно-оптичних матеріалів. Для досягнення зазначеної мети передбачається синтез відповідних органічних лігандів (на основі біологічно важливих гетероциклів), розробка та одержання кристалів π-комплексів купруму(I), дослідження їх будови сучасними фізико-хімічними методами (зокрема, рентгенівськими методами монокристалу та порошку, ІЧ-спектроскопії, ЯМР-спектроскопії), проведення квантово-хімічних обчислень (DFT) та дослідження взаємозв'язку між будовою координаційних сполук і їх фізико-хімічними характеристиками з метою оптимізації функціональних властивостей одержаних матеріалів. Дослідження нелінійно-оптичних властивостей одержаних π-координаційних сполук купруму буде проведене з використанням як нано- так і фемтосекундного лазерних імпульсів.

### Мета роботи англійською:

The purpose of the work is the development of new nonlinear optical materials. To achieve this goal copper(I) π,σ-coordination compounds based on allyl derivatives of biologically important heterocyclic compounds will be synthesized and studied by modern physicochemical methods (in particular, X-ray single crystal diffraction, IR spectroscopy, NMR spectroscopy) and a number of quantum-chemical calculations (DFT) will be performed. In order to optimize the functional properties of the materials exploring of the relationship between the structure of coordination compounds and their physico-chemical characteristics will be performed. The photoinduced NLO study will be performed both the nano- as well as femtosecond laser pulses.

### Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Інше

### Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

**Вид роботи:** 39 - фундаментальна

**Очікувані результати:** Наукові публікації

**Галузь застосування:** Дослідження і розробки в галузі природничих наук

**Керівники роботи**

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

**Науковий ступінь:**

**Вчене звання:**

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

## VII. Етапи 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

## VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

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

**Коди тематичних рубрик:** 31.15.17, 31.17, 31.17.29.09

## IX. Заключні відомості

**Керівник юридичної особи** Мельник Володимир Петрович
д. філос. н., 09.00.01

**Відповідальний за підготовку облікових документів** Кордан В.М.

**Телефон** +38 (068) 437-65-58

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності** Юрченко Т.А.