

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000790

Державний реєстраційний номер: 0120U100133

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Вплив галоген-іона на оптичні та люмінесцентні властивості лантанідів Ln в окисдно-галогенідних кристалах та комплексах.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1891.593

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив окисно-відновних реакцій на фотолюмінесценцію лантанідів у різних валентних станах в окисдно-галогенідних кристалах та комплексах

Назва роботи англійською:

The effect of redox reactions on the photoluminescence of lanthanides in different valence states in oxide-halide crystals and complexes

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - формування люмінесцентних центрів Eu(II) у структурі хлорборатів та силікатів ЛЗМ, модифікація тетрапірольних лігандів та їх комплексів з лантанідами галогенвмісними фрагментами. Мета роботи - аналіз впливу галоген-іону на оптичні та люмінесцентні властивості лантанідів Ln(II)/(III) в окисдно-галогенідних кристалах; синтез комплексів лантанідів із заміщеними галогентетрапіролами та аналіз факторів, які визначають люмінесцентні характеристики та фотостабільність отриманих комплексів. Показано, що довгохвильове положення максимуму люмінесценції іонів Eu²⁺ у Ca₂BO₃Cl (λ_{max} = 576 нм) пов'язане з двома факторами: значним розщепленням 4f65d-конфігурації іона Eu²⁺ кристалічним полем та відносно високим ступенем ковалентності зв'язку метал-ліганд. Зроблено висновок, що довготривале післясвічення Ca₂BO₃Cl:Eu²⁺,Ce³⁺ зумовлено фотоіндукованим переходом Eu²⁺ → Eu³⁺ з наступним захопленням делокалізованих електронів дефектами ґратки. Встановлено кристалохімічні фактори, які відповідають за низьку стійкість іонів Eu²⁺ у цих сполуках. Зроблено висновок, що активовані іонами Eu²⁺ та Ce³⁺ хлорборати та силікати кальцію складу Ca₂BO₃Cl, Ca₃SiO₄Cl₂ є перспективними матеріалами для знаків безпеки нічного режиму. Розроблено методики синтезу комплексів лантанідів з галогензаміщеними тетрапірольними макроциклами. Показано, що в ряду орто-мета-пара хлорвмісних ізомерів внутрішньомолекулярні інтеркомбінаційні переходи сповільнюються, що призводить до збільшення квантового виходу та часу життя молекулярної флуоресценції. Запропоновано шляхи переносу енергії збудження в ітербійвмісних фталоціанінатах. Гасіння флуоресценції може бути наслідком швидкого переходу з синглетного стану у стан переносу заряду, який обумовлено переходом π-електронів з орбіталі фталоціаніну на орбіталь іону Yb(III) з відновленням останнього до двохвалентного стану Yb(II). З'ясовано фактори, які визначають люмінесцентні характеристики та фотостабільність деяких комплексів.

Реферат англійською:

The object of the research is the formation of Eu²⁺-emitting centers in alkaline earth chloroborates and silicates, modification of tetrapyrrole ligands and their complexes with halogen-containing lanthanide fragments. The purpose of the work is to analyze the effect of halogen-ion on the optical and fluorescent properties of Ln(II)/(III) lanthanides in oxide-halide crystals; synthesis of lanthanide complexes with halogen-containing tetrapyrroles and analysis of factors that determine luminescent characteristics and photostability of the obtained complexes. It is shown that the long wavelength position of the Eu²⁺-emission maximum in Ca₂BO₃Cl (λ_{max} = 576 nm) is caused by two factors: the large crystal field splitting of the Eu²⁺ 4f65d configuration of the Eu²⁺ ion and the relatively high degree of covalence of the metal-ligand bond. It is concluded that the long-time afterglow of Ca₂BO₃Cl:Eu²⁺,Ce³⁺ is due to the photoinduced Eu²⁺ → Eu³⁺ transition with subsequent capture of delocalized electrons by host lattice defects. It is shown that doped with Eu²⁺ and Ce³⁺ ions calcium chloroborates and silicates of composition Ca₂BO₃Cl, Ca₃SiO₄Cl₂ are promising materials for night safety signs. Synthesis methods of lanthanide complexes with tetrapyrrole macrocycles modified by halogen-containing fragments have been developed. It has been shown that in a series of ortho-meta-para isomers intramolecular intercombinational transitions are slowed down by influencing of the heavy atom, which leads to an increase of quantum yield and lifetime of the molecular fluorescence. The ways of excitation energy transfer in ytterbium-containing phthalocyanines are proposed. It is

shown that quenching of the fluorescence may be the result of a fast transition from a singlet state to a state of charge transfer, which is due to the transition of π electrons from the phthalocyanine orbital to the orbital of the Yb(III) ion with the reduction of the latter to the divalent state Yb(II).

Індекс УДК: 546, 546.650:549.4:628.9.037

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Доценко Володимир Павлович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Люмінесцентний матеріал

Назва НТП англійською: Luminescent material

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Приладобудування (пристрої оптоелектроніки).

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Полікристалічний $\text{Ca}_2\text{BO}_3\text{Cl}$, активований іонами Eu^{2+} та Ce^{3+} , демонструє ефективну люмінесценцію з максимумом при 576 нм, яка характеризується довготривалим післясвіченням (> 1 год) після збудження в УФ області. Завдяки своїм властивостям цей матеріал є перспективним люмінофором для знаків безпеки в нічний час.

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: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Споживачі продукції: Підприємства у галузі приладобудування

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Люмінесцентні випромінювачі ближнього інфрачервоного діапазону.

Назва НТП англійською: Luminescent emitters of the near infrared range.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Приладобудування (пристрої оптоелектроніки).

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Сполуки Yb (III) та Nd (III) з галогенопохідними тетрапірольними макроциклів характеризуються ефективною інфрачервоною (ІЧ) люмінесценцією. Квантовий вихід люмінесценції комплексу Nd (III) з метазаміщеним ізомером королю досягає $5 \cdot 10^{-3}$, що робить його перспективним ІЧ-випромінювачем.

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: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Споживачі продукції: Підприємства у галузі приладобудування

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

1. 4f-Luminescence of lanthanide ions in regioisomeric corrole complexes / Semenishyn N.N., Smola S.S., Rusakova M.Yu., Rusakova N.V. // Ukrainian Chemistry Journal - 2021. - Vol. 87, № 9. - P. 35-44.

<https://doi.org/10.33609/2708-129X.87.09.2021.35-44>.

2. Semenishyn N.N. Lanthanide complexes with regioisomers of chloro-substituted tetraphenylporphyrin // Вісник ОНУ. Хімія. - 2021. - Т. 26, № 3. - С. 27-36. [https://doi.org/10.18524/2304-0947.2021.3\(79\).240750](https://doi.org/10.18524/2304-0947.2021.3(79).240750).

3. Спектроскопічне дослідження сольових плавів системи $\text{SmF}_3\text{-CeF}_3\text{-NaCl-KCl}$ / Зінченко В.Ф., Єрьомін О.Г., Стоянова І.В., Вольчак Г.В., Чівірева Н.О., Дога П.Г., Стамікосто О.В. // Вісник ОНУ. Хімія. - 2021. - Т.26, вип. 5(77).- С. 26-36. DOI: [https://doi.org/10.18524/2304-0947.2021.1\(77\).226135](https://doi.org/10.18524/2304-0947.2021.1(77).226135).

4. Efficient sensitized luminescence of binuclear Ln(III) complexes based on a chelating bis-carbacylamidophosphate / Horniichuk, O.Y., Kariaka, N.S., Smola S.S., Rusakova N.V., Trush V.O., Sliva T.Y., Amirkhanov V.M. // Journal of Fluorescence. - 2021. - Vol. 31. - P. 1029-1039. DOI: 10.1007/s10895-021-02733-0.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

Д. Х. Н.

Перелік осіб-виконавців

Єрьомін Олег Георгійович

(к. х. н.)

Єфрюшина Нінель Петрівна

(д. х. н., 02.00.02)

Березовська Ірина Всеволодівна

(к. х. н.)

Вольчак Ганна Василівна

(к. х. н.)

Дога Павло Геннадійович

Доценко Володимир Павлович

(д. х. н.)

Желтвай Іван Іванович

(к. х. н., 02.00.02)

Зінченко Віктор Федосійович

(д.х.н., 02.00.01)

Коровін Олександр Юрійович

Кучер Альберт Олександрович

Магунов Ігор Робертович

(к. х. н., 02.00.01)

Починок Ільвіра Вікторівна

Русакова Наталія Володимирівна

(д. х. н., 02.00.01)

Садковська Людмила Василівна

Семенішин Микола Миколайович

(к. х. н.)

Смола Сергій Сергійович

(к. х. н.)

Стамікосто Олена Володимирівна

Стоянова Ірина Вікторівна

(к. х. н., 02.00.02)

Теслюк Ольга Іванівна

(к. х. н., 02.00.02)

Хоменко Олена Володимирівна

(к. х. н.)

Чівірева Наталія Олексіївна

(к. х. н., 02.00.02)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Ілляшко Н. О.

Телефон

+38 (067) 724-39-55

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

