Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U003048

Державний реєстраційний номер: 0116U002521

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-01-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу:

Назва етапу:

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Вид звітного документа:

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: +38 (0432) 50-89-30 , +38 (0432) 50-87-78

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: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 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.): 311.11

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Поліоксомолібдати та поліоксовольфрамати з одно-, дво- та тризарядними катіонами металів для створення новітніх матеріалів

Назва роботи англійською:

Polyoxomolybdates and polyoxotungstates with single, double, and triple charged metal cations for the development of new materials

Реферат українською:

Методами хімічного аналізу, РФА та ІЧ-спектроскопії встановлено, що з непідкисленого розчину Na2WO4 (Z = ?(H+) / ?(WO42-) = 0.00) відбувається осадження церій ортовольфрамату Ce2(WO4)3?9H2O. З водно-ацетонового середовища (v/v = 50/50) за Z = 0.80 синтезовано натрію гетерополідекавольфрамоцерат (III) Na9[Ce(W5O18)2]·28H2O з аніоном зі структурою Пікока-Уіклі. З водного розчину за Z = 0.80 без додавання ацетону в результаті повільного видалення розчинника відбувається кристалізація натрію-гідрогену гетерополідекаволфрамоцерату (IV) Na6H2[Ce(W5O18)2]·30H2O з аніоном зі структурою Пікока-Уіклі. Методами хімічного аналізу та ІЧ-спектроскопії встановлено, що з розчину за Z =1.17 відбувається осадження Ce5[HW7O24]3?56H2O. Методом РФА показано, що під час прожарювання Ce5[HW7O24]3?56H2O за 5000С відбувається кристалізація тільки WO3, а прожарювання за 7000С супроводжується кристалізацією ще й фази Ce4W9O33. Методами хімічного аналізу та ІЧ-спектроскопії встановлено, що з витриманих підкисленими за Z =1.17 та 1.29 розчинів синтезовано церій паравольфрамати Б - Ce10[W12O40(OH)2]3?94H2O (Z = 1.17) та Na10Ce20[W12O40(OH)2]7?180H2O (Z = 1.29), а з розчину за Z =1.364 осаджується ундекавольфрамоцерат Na2Ce2[Ce2(H2O)10W22O72(OH)2]?35H2O з лакунарними метавольфрамат-аніонами в якості лігандів. Розроблено умови синтезу Na9[Pr(W5O18)2]?34,25H2O з підкисленого до Z = 0,80 водного розчину натрію вольфрамату з відношенням ?(Pr) : ?(W) = 1 : 10 з висолюванням дією ацетону. Методами ІЧ та КР-спектроскопії показано належність аніону в синтезованій сполуці до структури Пікока-Уіклі. Проведено РСА Na9[Pr(W5O18)2]?34,25H2O, аналіз якого показав, що структури поліоксовольфраматів подібного типу (як за параметрами ячейки, так і за складом і характером упаковки) в літературі й базах даних структур не описані. Досліджено умови утворення монокристальних солей Купруму (II) з аніоном паравольфрамата Б з водних розчинів Cu(NO3)2-Na2WO4-HNO3-H2O різної кислотності Z = ?(H+)/?(WO42-)=0,00; 1,17; 1,29. Методом РСА проведено розшифровку структури монокристалів Na2Cu3(CuOH)2[W12O40(OH)2]·32H2O, Na2Cu4[W12O40(OH)2]·22H2O та Cu5[W12O40(OH)2]·2Cu(OH)2·30H2O. Методом pH-потенціометричного титрування та математичного моделювання досліджено стан індивідуальних ізополівольфрамат-аніонів (ІПВА) у системі "WO42- - H+ - Трисоль". Побудовано математичну модель рівноважних процесів у системі "WO42- - H+ - Трисоль". Розраховано значення lgKC реакцій утворення ІПВА HW7O245-, W12O40(OH)210-, W12O38(OH)26- та побудовано діаграми розподілу аніонних форм у фізіологічному розчині Трисоль у залежності від pH розчину. Методом рентгенофазового аналізу (з застосуванням алгоритму Ритвельда), скануючої електронної мікроскопії й вимірюванням електричної провідності досліджено заміщення неодиму на РЗЕ в системах Nd5-xLnxMo3O16 (Ln = La, Ce, Pr). В інтервалі складів від x = 0 до x = 0.5, 0.3 та 5.0 із сумішів оксидів відповідних РЗЕ та MoO3 в результаті твердофазних реакцій за 1050°C утворюються однофазні тверді розчини зі структурою флюориту з подвоєними параметрами елементарних комірок. Параметри елементарних комірок твердих розчинів зі збільшенням x у системах із La та Pr закономірно зростають, а в системі з Ce - зменшуються. Питома електропровідність кераміки цих твердих електролітів зростає до 17 разів порівняно з немодифікованим Nd5Mo3O16.

Реферат англійською:

The formation of cerium orthotungstate Ce2(WO4)3·9H2O from non-acidified solution of Na2WO4 (Z =

?(H+)/?(WO42-) = 0.00) was determined by the chemical analysis, XRD, and FTIR spectroscopy. From aqua-acetone media (v/v = 50/50) at Z = 0.80 the sodium heteropoly decatungstocerate (III) Na9[Ce(W5O18)2]·28H2O with Peacock-Weakley anion structure was synthesized. From acidified up to Z = 0.80 aqueous solution of sodium tungstate without acetone adding the acid sodium heteropoly decatungstocerate (IV) Na6H2[Ce(W5O18)2]·30H2O with Peacock-Weakley anion structure was synthesized. From the solution with Z = 1.00 the cerium heptatungstate Ce2W7O24·20H2O was synthesized, and by XRD it was shown that it thermal decomposition accompanied with crystallization of Ce4W9O33 and WO3 phases. By the chemical analysis and FTIR spectroscopy it was shown that the Ce5[HW7O24]3·56H2O was synthesized from solution with Z = 1.17, and by XRD method it was shown that calcination of Ce5[HW7O24]3·56H2O at 5000C occurs with only WO3 phase crystallization, and calcination at 7000C accompanied with crystallization of Ce4W9O33 phase. By the chemical analysis and FTIR spectroscopy it was shown that the cerium paratungstates B - Ce10[W12O40(OH)2]3·94H2O and Na10Ce20[W12O40(OH)2]7·180H2O were synthesized from equilibria solutions with Z = 1.17 and 1.29, respectively, and Na2Ce2[Ce2(H2O)10W22O72(OH)2]·35H2O with lacunar metatungstate-anions as ligands was synthesized from the solution at Z = 1.364. The conditions for the synthesis of novel praseodymium(III)-containing salt, Na9[Pr(W5O18)2]?34.25H2O, with heteropoly tungstate anion were determined. By the methods of chemical analysis, FT-IR, and FT-Raman spectroscopy it was shown that sodium heteropoly decatungstopraseodymate(III) Na9[Pr(W5O18)2]?34.25H2O was precipitated from Na2WO4 solution under Z=?(H+)/?(WO42-)=0.80 after adding of acetone. By FT-IR and FT-Raman spectroscopy, the heteropoly anion is shown to belong to the Peacock-Weakley structural type. By the method of scanning electron microscopy it was shown that the grain size of Na9[Pr(W5O18)2]?34.25H2O is within the range of 200-450 nm. Homogeneity of the obtained phase was confirmed by the uniform contrast of the surface mode of backscattered electrons. An X-ray single crystal analysis was carried out and crystal structure for Na9[Pr(W5O18)2]?34.25H2O was determined. It was established that no polytungstate structures of this type (both the unit cell parameters and the composition and packing within the structure) are described in the literature. Neodymium substitution with rare earth elements (REE) was studied in the systems Nd5 xLnxMo3O16 (Ln = La, Ce, Pr) by means of X-ray powder diffraction (including the Rietveld algorithm), scanning electron microscopy (SEM) and by measurements of the electrical conductivity. At x values of 0, 0.5, 0.3, and 5.0 the mixtures of REE oxides with MoO3 transform to single-phase solid solutions with fluorite structure and doubled unit cell parameters as a result of solid-state reactions occurring at 1050°C. In the systems with La and Pr the unit cell parameters of solid solutions increase as x increases while in the system with Ce these parameters decrease. Conductivity of ceramic solid electrolytes increases up to 17 times compared with the unmodified Nd5Mo3O16.

Індекс УДК: 351.85, 546(786+65+66) + 548.32 +539.26 + 544.354.081.7

Коди тематичних рубрик: 13.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Розанцев Георгій Михайлович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Лабораторний практикум із курсу "Структурна та супрамолекулярна хімія" для студентів СО "Бакалавр" напряму підготовки "Хімія"

Назва НТП англійською: Laboratory practical work on the course "Structural and Supramolecular Chemistry" for students of the degree of "Bachelor" training areas "Chemistry"

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: методична документація (лабораторний практикум)

Галузь застосування: 85.42 Вища освіта. 72.10 Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Лабораторний практикум із курсу "Структурна та супрамолекулярна хімія" для студентів СО "Бакалавр" напряму підготовки "Хімія" включає сім лабораторних робіт із аналізу кристалічної будови поліоксометалатів і вивчення супрамолекуоярної взаємодії: "Аналіз структурної інформації з кристалічної будови лантанід-вмісних гетерополівольфраматів за допомогою програми Mercury 1.4.2 (Build 2)", "Аналіз кристалічної будови сполук із стекінг-взаємодією за допомогою програми Mercury 1.4.2 (Build 2)", "Визначення зарядового стану іонів за даними рентгеноструктурного аналізу. Розрахунок сум валентностей зв'язків (BVS)", "Ротаксани: встановлення умов синтезу та аналіз кристалічної будови", "Аналіз кристалічної будови сполук за допомогою програми Diamond 3D", "Дослідження структури гетерополісполук за допомогою програми Diamond 3D", "Рентгеноструктурний аналіз лантанід(III)-вмісних поліоксовольфраматів із використанням програмного пакету "CrysAlis(Pro)" та "Shelx"". Лабораторні роботи, в основу яких покладено авторські ре

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2018 рік, ДонНУ імені Василя Стуса

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: заклади вищої освіти

Перспективні ринки: ринок освітніх і наукових послуг України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 30

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 60

Очікуваний термін окупності (років): 3

Додаткова інформація: невиключна ліцензія-

IX. Бібліографічний опис

1. Розанцев Г.М., Радио С.В., Игнатьева В.В., Гумерова Н.И., Марийчак А.Ю. Комплексообразование в растворе и периодичность термодинамических характеристик поливольфрамолантанидатов. - Винница: Нилан Лтд., 2018. - 220 с. (Рішення Вченої ради від 26.06.2018р., протокол №12). 2. Gumerova N.I., Rompel A. Synthesis, structures and applications of electron-rich polyoxometalates (Review) // Nature Reviews Chemistry. - 2018. - Vol. 2, No. 2. Article number 0112. - P. 1-20. 3. Get'man E.I., Ignatov A.V., Prisedsky V.V., Borysova K.V. Complete and limited substitution of rare-earth elements in apatite silicates La(9-x)Lnx(SiO4)6O1.5 // Solid State Sciences. - 2018. - Vol. 76. - P. 8-14. 4. Poimanova E.Y., Medved' A.O., Radio S.V., Baumer V.N., Arzumanyan G.M., Doroshkevich N.V., Khomutova E.V., Belousova E.E., Rozantsev G.M., Panyushkin V.T. Nickel Decatungstate [Ni(C2H6SO)5(H2O)]2[W10O32]: Synthesis from a Water-Dimethylsulfoxide Solution, Crystal Structure Determination, IR and Raman Spectroscopic Analysis, Surface Micromorphology // Journal of Structural Chemistry. - 2018. - Vol. 59, No. 1. - P. 145-153. 5. Poimanova O.Y., Radio S.V., Medvid A.O., Kretova O.A., Bilousova K.Y., Baumer V.N., Arzumanian G.M., Doroshkevich N.V., Panyushkin V.T. Hexakis(dimethylsulfoxide-O)-cobalt(II) hexatungstate, [Co(C2H6OS)6][W6O19]: synthesis from aqueous dimethylsulfoxide solution, crystal structure determination, FT-IR and Raman spectroscopy analysis, and surface micromorphology // Journal of Coordination Chemistry. - 2018. - Vol. 71, No. 3. - P. 444-456. 6. Get'man E.I., Radio S.V., Ardanova L.I. Predicting the Phase Stability of Sc1-xLnxPO4 (Ln = Gd-Lu, Y) Zircon-Structured Solid Solutions // Inorganic Materials. - 2018. - Vol. 54, No. 6. - P. 596-600. 7. Gumerova N., Krivosudsk? L., Fraqueza G., Breibeck J., Al-Sayed E., Tanuhadi E., Bijelic A., Fuentes J., Aureliano M., Rompel A. The P-type ATPase inhibiting potential of polyoxotungstates // Metallomics. - 2018. - Vol. 10, No. 2. - P. 287-295. 8. Gumerova N.I., Al-Sayed E., Krivosudsk? L., ?ip?i?-Paljetak H., Verbanac D., Rompel A. Antibacterial activity of polyoxometalates against Moraxella catarrhalis // Front. Chem. - Inorganic Chemistry (special issue "Polyoxometalates in Catalysis, Biology, Energy and Materials Science"). - 2018. - in press. https://www.frontiersin.org/research-topics/7090/polyoxometalates-in-catalysis-biology-energy-and-materials-science 9. Пойманова Е.Ю., Радио С.В., Белоусова Е.Е., Розанцев Г.М., Панюшкин В.Т. Изополивольфрамат-анионы в водно-диметилсульфоксидных растворах // Журнал неорганической химии. - 2018. - Т. 63, № 9. - 9 с. 1223-1231. 10. Марийчак А.Ю., Розанцев Г.М., Радио С.В. Образование средней соли натрия с гетерополидекавольфрамотулиат(III)-анионом Na9[Tm(W5O18)2]·35H2O в водном растворе // Аналитика РБ-2018. Сборник статей Шестой республиканской конференции по аналитической химии с международным участием (16-19 мая 2018 года, Минск, Беларусь). - Минск: Колорград, 2018. - С. 241-242.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Проректор з наукової роботи Хаджинов Ілля Васильович

Перелік осіб-виконавців

Єрошина Катерина Вікторівна

Іванцова Елла Сергіївна

Баумер Вячеслав Миколайович

Гетьман Євген Іванович

Гумерова Надія Ісмагілівна

Марійчак Олександра Юріївна

Радіо Сергій Вікторович

Розанцев Георгій Михайлович

Румянцева Жанна Олександрівна

Усачов Олег Михайлович

Шевченко Марія Миколаївна

Шульжук Богдан Володимирович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

