

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U003237

Державний реєстраційний номер: 0118U001103

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-01-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Спектроскопічні дослідження моногідроксильних спиртів і води в матричній ізоляції.

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 239-31-88

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201290

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 442.3
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Воднево-зв'язані молекулярні кластери всередині наноструктурованих матеріалів.

Назва роботи англійською:

Hydrogen-bounded molecular clusters within nanostructured materials.

Реферат українською:

Проведено конформаційний аналіз моногідроксильних спиртів (етанол, n-бутанол, n-гексанол) методами квантово-хімічного моделювання, розраховано оптимальні геометрії та енергії можливих структур. Визначено найбільш стійкі конформери. Аналізуючи експериментально зареєстровані спектри ІЧ поглинання моногідроксильних спиртів в матричній ізоляції та використовуючи результати квантово-хімічних розрахунків, встановлено кількісні співвідношення різних конформерів етанолу, n-гексанолу та n-бутанолу в низькотемпературних матрицях при різних температурах. Зареєстровано спектри ІЧ поглинання води, ізольованої в аргонівій матриці, при температурах від 9 К до 50 К. Виконано віднесення спектральних смуг, що спостерігаються в експерименті, до кластерів води, які складаються з різної кількості молекул. Показано, що при нагріванні матриці збільшується розмір ізольованих в ній воднево-зв'язаних кластерів. Визначено вплив аргонівій матриці на ізольовані в ній кластери води, який полягає у послабленні водневого зв'язку між молекулами в аргонівію оточенні. Це проявляється в коливальних спектрах у вигляді високочастотного зсуву смуг ІЧ поглинання, що відповідають валентним коливанням гідроксильної групи. Запропоновано методики активації води, які дають можливість отримувати водні розчини деяких апіпродуктів, відкриваючи перспективи пошуку нових технологій для екстракції флавоноїдів з гідрофобних речовин.

Реферат англійською:

The conformational analysis of monohydroxyl alcohols (ethanol, n-butanol, n-hexanol) by quantum-chemical modeling was carried out. The optimal geometries and energy of possible structures were calculated. The most stable conformers were defined. Quantitative relationships between different conformers of ethanol, n-hexanol and n-butanol in low temperature matrices at different temperatures were established by analyzing the experimentally recorded of IR spectra of monohydroxyl alcohols in matrix isolation and using the results of quantum-chemical calculations. The infrared absorption spectra of water isolated in an argon matrix are recorded at temperatures from 9 K to 50 K. The spectral bands observed in the experiment are assigned to water clusters that consist of different molecules. It is shown that the size of the hydrogen-bound clusters isolated in it increases when heating the matrix. The influence of the argon matrix on the water cluster isolated in it was determined. The effect is to reduce the hydrogen bond between the molecules in the argon environment. It manifests in the vibrational spectra in the form of a high-frequency shift of the IR absorption bands corresponding to the valence vibration of the hydroxyl group. The methods of water activation were offered. That's give the opportunity to get aqueous solutions of some apipopods by opening the prospect of finding new technologies for the extraction of flavonoids from hydrophobic substances.

Індекс УДК: 532, 535.33/.34; 532

Коди тематичних рубрик: 29.17.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Дорошенко Ірина Юріївна

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: с.д.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Інформація про структурні перетворення, які відбуваються при зміні розмірів порожнин матриці.

Назва НТП англійською: Information about structural transformations that occur when changing the size of cavities of the matrix.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: наукова документація

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Інформація про температурні залежності коливальних спектрів досліджуваних об'єктів (вода, спирти) в матричній ізоляції та про структурні перетворення, що відбуваються в них при зміні температури. Конформаційний аналіз молекул спиртів з довгими алкільними ланцюжками (п-бутанол, п-гексанол) в матричній ізоляції. Нові методи активзації води - електроліз та насичення молекулярним воднем, які були успішно реалізовані в експерименті. Спектрофотометричний метод, який дозволяє порівнювати ефективність екстракції флавоноїдів з об'єктів природного походження. Виявлено умови, при яких ефективність екстракції флавоноїдів є найвищою.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2018

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: кафедра експериментальної фізики, навчальний процес

Перспективні ринки: Україна та інші країни

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:

IX. Бібліографічний опис

E.N. Kozlovskaya, I. Doroshenko, V. Pogorelov, Ye. Vaskivsky, G.A. Pitsevich. Comparison of Degrees of Potential-Energy-Surface Anharmonicity for Complexes and Clusters with Hydrogen Bonds // Journal of Applied Spectroscopy. - V. 84, No. 6. - 2018. - P. 929 - 938. E.N. Kozlovskaya, G.A. Pitsevich, A.E. Malevich, O.P. Doroshenko, V.E. Pogorelov, I.Yu. Doroshenko, V. Balevicius, V. Sablinskas, A.A. Kamnev. Raman spectroscopic and theoretical study of liquid and solid water within the spectral region 1600-2300 cm⁻¹ // Spectrochimica Acta Part A. - V. 196. - 2018. - P.406 - 412. Vasylieva A., Doroshenko I., Vaskivskyi Ye., Chernolevska Ye., Pogorelov V. FTIR study of condensed water structure // Journal of Molecular Structure. - 2018. - V. 1167. - P. 232-238. Ye. Vaskivskyi, Ye. Chernolevska, A. Vasylieva, V. Pogorelov, R. Platakyte, J. Stocka, I. Doroshenko. 1-hexanol conformers in a Nitrogen Matrix: FTIR Study and High-Level ab initio Calculations // Journal of Molecular Liquids (in press).

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Мартинюк Віктор Семенович

д. б. н., 03.00.02

Перелік осіб-виконавців

Буско Т.О.

Васильєва А.О.

Васківський Є.В.

Віхрова Є.А.

Терещенко О.М.

Чернолевська Є.А.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

