Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U000887

Державний реєстраційний номер: 0117U004136

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-03-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Синтез калікс[4]аренів, що містять один або два фрагменти 12-краун-4(12-азакраун-4), що приєднані по нижньому краю каліксарену за допомогою метиленового, етиленового і амідного містків та гомологічних рядів дибензімідазо-краун-етерів (ДБІКЕ). Вивчення будови та спектрально-люмінесцентних властивостей одержаних сполук та їх комплексів з іонами лантанідів. Порівняльний аналіз 4f-люмінесцентних характеристик гетероядерних комплексів лантанідів у видимій і ІЧ областях спектру, залежно від природи других металів. Термодинамічні розрахунки розчинності фторидів лантанідів у сольовому розплаві системи NaCl-KCl на основі концепцій кислотності-основності та обмінних реакцій. Визначення умов включення вказаних комплексів до супрамолекулярних агрегатів на основі ПАР. Спектроскопічне дослідження залежності оптичних властивостей синтезованих алюмінатів та силікатів елементів II-III груп (див. вище) від умов синтезу та розміру часток. Формування баз даних показників переломлення і температур плавлення

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 048 766-20-44: факс 048 765-96-02

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, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 983.029

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Прогнозування, молекулярний дизайн й спрямований синтез нових координаційних сполук металів II та III груп Періодичної системи із заданими оптичними властивостями.

Назва роботи англійською:

Prediction, molecular design and new coordination compounds metals of II and III groups the Periodic system directed synthesis with given optical properties.

Реферат українською:

Здійснений синтез ряду заміщених по нижньому ободу похідних п-трет-бутилкаликс[4]арена, N-метоксикарбонилмоноаза-12-краун-4-эфірні фрагменти. Проведена оцінка екстракційних властивостей синтезованих з'єднань відносно пікратів деяких перехідних металів методом екстракції рідина-рідина. Досліджений вплив азакраун-ефірного заступників на координуючі і спектральні властивості похідних п-трет-бутілкалікс[4]арена і ДБІКЕ, а також комплексів лантанідів на їх основі. Характерна 4f-люмінесценція у видимій і ближній ІЧ-області спостерігається лише для комплексів Eu(III), Tb(III) і Yb(III), квантові виходи яких складають - 0,018-0,024; 0,212-0,452 і 0,0019-0,0042, відповідно. Максимальні показники 4f-люмінесценції спостерігаються для комплексів з дізамещенних 12-азакраун-4-ефірного калікс[4]арена і похідними ДБІКЕ. Проведена оцінка розчинності фторидів лантанідів LnF3 від LaF3 до LuF3 в сольовому розплаві NaCl-KCl на основі концепції кислотності-основності і термодинамічних розрахунків обмінних реакцій між речовиною, що розчиняється, і розчинником. Розроблена методика хімічного аналізу для експериментального визначення вмісту іонів Ln3+ і F? у сольовому плаві і LnF3. Методом горіння отриманий нанорозмірний (10-70 нм) Al2O3, активований іонами марганцю (Mn3+). Показано, що частина іонів Mn знаходиться в стані окислення +2 і займає в Al2O3 позиції тетраедрів, обумовлюючи широку смугу люмінесценції з максимумом при ~520 нм. Систематизовано дані про способи отримання дибензімідазо-краун-етерів (ДБІКЕ) на основі біс (бензімідазоліл-2)-алканів. Розроблено препаративні способи синтезу гомологічних рядів ДБІКЕ, які відрізняються кількістю донорних центрів та варійованими розмірами порожнини. Напрацьовано низку дослідних зразків ДБІКЕ. На базі зібраної інформації, щодо температур плавлення та показників заломлення n (при довжинах хвиль світлу: ?=589,3 нм, ?=550 нм та ?=2500 нм) неорганічних сполук різноманітних класів за допомогою нелінійного методу Random Forest з застосуванням 1D дескрипторів побудовано задовільні QSPR моделі з прийнятними статистичними показниками щодо якості прогнозування - R2(oob). = 0,87-0,90; R2(ts) = 0,68-0.94.

Реферат англійською:

Synthesis of number substituted by lower rim p-tert-butylcalyx[4]arene derivatives, containing N-methoxycarbonyl-monoaz-12-crown-4-ethers fragments were done. Assessment of extraction properties of synthesized compounds relative picrates of some transition metals was carried out by extraction method. liquid-liquid. Effect of azacrown-ether substituents on coordinating and spectral properties of p-tert-butyl calix[4]arene and DBICE derivatives, also lanthanide complexes on their based, was investigated. Typical 4f-luminescence in visible and near-IR regions is observed only for Eu(III), Tb(III) and Yb(III) complexes, whose quantum yields are 0.018-0.024; 0.212-0.452 and 0.0019-0.0042, respectively. Maximum 4f-luminescence values are observed for complexes with disubstituted 12-azacrown-4-ether calix[4]arena and DBICE derivatives. Solubility of lanthanides fluorides LnF3 from LaF3 to LuF3 in salt melt of NaCl-KCl based on concept of acidity-basicity and thermodynamic calculations of exchange reactions between solute and solvent was carried out. Method of chemical analysis for experimental determination of Ln3+ and F- ions content in salt melt and LnF3 was developed. Nanoscale (10-70 nm) Al2O3, activated with manganese ions (Mn3+), was obtained by combustion method. It was shown, that part of Mn ions is in +2 oxidation state and occupies tetrahedral positions in Al2O3, causing wide luminescence band with

maximum at ~ 520 nm. Systematized data about methods for obtaining dibenzimidazo-crown ethers (DBICE) based on bis-(benzimidazolyl-2)-alkanes. Preparative methods have been developed for synthesis of homologous DBICE series, which differ in number of donor centers and in varying cavity sizes. Achieved a number of prototypes DBICE. Based on information gather relative melting temperatures and refractive indices n (at light wavelengths: ? = 589.3 nm, ? = 550 nm and ? = 2500 nm), inorganic compounds of various classes by non-linear Random Forest method using 1D descriptors are constructed QSPR models with adequate statistical indicators regarding quality of forecasting - R2(oob). = 0.87 - 0.90; R2(ts) = 0.68-0.94.

Індекс УДК: 548, 547.7/8;548.736;544.6/621.039+544.164;544.135;537.37:546.623.31+546.65;535.37. 541.65

Коди тематичних рубрик: 31.15.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Камалов Герберт Леонович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Синтез ряду різного ступеня заміщених по нижньому ободу похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену, що містять N-метоксікарбонілмоноаза-12-краун-4-ефірні фрагменти. Препаративні способи синтезу гомологічних рядів ДБІКЕ, які відрізняються кількістю донорних центрів та варійованими розмірами порожнини. Метод отримання активованого іонами марганцю Mn3+ нанорозмірного оксиду алюмінію з розміром частинок 10-70 нм, що складається з суміші метастабільних модифікацій (?*,?) Al2O3 з іонами Mn які знаходяться в стані окислення +2 і займають в ?*-Al2O3 тетраедричні позиції, обумовлюючи широку смугу люмінесценції з максимумом при ~ 520 нм.

Назва НТП англійською: Synthesis of series in different steps substituted by lower rim p-tert-butylcalyx[4]arene derivatives, containing N-methoxycarbonyl-monoaz-12-crown-4-ethers fragments. Preparative methods for synthesis of homologous series DBICE, which differ in number of donor centers and varying cavity size. Method for obtaining Mn3+ ion-activated nanosized aluminum oxide with a particle size 10-70 nm, consisting mixture of metastable Al2O3 modifications (?*, ?) with Mn ions that are in oxidation state +2 and occupy tetrahedral positions in ?*-Al2O3, causing wide luminescence band with maximum at ~ 520 nm.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезований ряд похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену, що містять N-метоксікарбонілмоноаза-12-краун-4-ефірні фрагменти. Оцінені екстракційні властивості синтезованих сполук: моно- і тризаміщений каліксарени проявляють властивості ефективних комплексонів щодо катіонів Na, для дізаміщених аналогів характерна висока екстракційна здатність по відношенню до катіонів Na, K, Rb і низька - по відношенню до катіонів лужноземельних і перехідних металів. Вивчено здатність моно-, ді- і тетра-заміщених п-трет-бутилкалікс[4]аренів з N-метоксікарбонілмоноаза-12-краун-4-ефірними заступниками по нижньому ободу виступати в якості переносників через рідкі мембрани хлоридів перехідних металів. Досліджено вплив азакраун-ефірного заступників на координуючі та спектральні властивості похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену і ДБІКЕ, а також комплексів лантанідів на їх основі. Характерна 4f-люмінесценції у видимій та ближній ІЧ-області спостерігається для комплексів Eu(III), Tb(III) і Yb(III), квантові виходи яких складають - 0,018-0

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Хімічна галузь

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

Зинченко В.Ф., Чигринов В.Э., Магунов И.Р., Стоянова И.В., Стоянов А.О. Влияние взаимодействия в системах халькошпинель-германий на свойства наносимых тонкопленочных покрытий. Вісник Українського матеріалознавчого товариства. - 2014. - Вип. 7. - С.115-123.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Єрьомін О.Г.

Іванов Ю.Е.

Алєксєєва О.О.

Антонович В.П.

Березовська І.В.

Дога П.Г.

Доценко В.П.

Зінченко В.Ф.

Камалов Г.Л.

Кириченко Т.И.

Коровін А.Ю.

Кузьмін В.Є.

Кулигіна К.Ю.

Огніченко Л.М.

Русакова Н.В.

Семенішин М.М.

Смола С.С.

Снурнікова О.В.

Стоянова И.В.

Хоменко О.В.

Чивирева Н.А.

Чіхічін Д.Г

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

