Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U000837

Державний реєстраційний номер: 0120U102376

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Композити на основі допованих наноструктур TiO2 і координаційних полімерів: синтез, будова, фазовий склад, морфологія та функціональні властивості

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417213

Місцезнаходження: проспект Науки, 31, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445251190

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: 380442350981

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.): 13286.228

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Композити на основі допованих наноструктур TiO2 і координаційних полімерів: синтез, будова, фазовий склад, морфологія та функціональні властивості

Назва роботи англійською:

Composites based on doped TiO2 nanostructures and coordination polymers: synthesis, structure, phase composition, morphology and functional properties

Реферат українською:

В результаті дослідження хімічного і фазового складу, морфології, текстурних характеристик цих матеріалів, їх фотокаталітичних і каталітичних властивостей, з'ясовано вплив природи прекурсорів неметалів, співвідношення (X) прекурсорів титану і неметалу, температури кальцинування (Тк) та інших умов їх одержання на ці чинники та їх фотокаталітичну (ФА) і каталітичну активність, виявлено прояви синергетичних ефектів. Виявлено залежності змін розмірів кристалітів анатазу, його відсотку в зразках, об'єму елементарної комірки, параметрів текстури, вмісту допантів від X і Тк. Встановлено якісний і кількісний вміст допантів, визначено їх стан і з'ясовано їх вплив на фотокаталітичну активність (ФАVIS, ФАSolar) цих матеріалів в процесах фотоокиснення антибіотиків і барвників. Розроблено універсальний системний підхід до синтезу meso-nc-TiO2 різної морфології. Досліджено структуро-спрямовуючий ефект азамакроциклічних катіонів Ni(II), Zn(II), та Cu(II) на формування йодидних кластерів Pb(II), Bi(III) Cd(II) в гібридних органо-неорганічних композитних перовскітах. На основі спектральних вимірювань для деяких сполук показано можливість розглядати їх як широкозонні напівпровідникові матеріали. На основі систематичного вивчення кристалічної будови координаційних полімерів, утворених сольватованими іонами Ni(II), Mn(II), Co(III), Cu(II), Zn(II), Cd(II) або азамакроциклічними катіонами Ni(II), Zn(II), Cu(II) з ароматичними кислотами, що містять гетероатоми азоту або сірки, встановлено основні типи міжмолекулярних взаємодій, які визначають особливості упаковки складових в кристалічних ґратках та розрахована їх пористість. Встановлено, що координаційним полімерам Zn(II) і Cd(II) притаманна фотолюмінесценція, яка виникає в результаті електронних переходів в містковому карбоксилатному ліганді. Отримано композити низки макроциклічних комплексів Zn(II) з органічними барвниками і встановлено, що параметри емісії барвників залежать від будови металокомплексної матриці.

Реферат англійською:

As a result, the chemical and phase composition, morphology, textural characteristics study of TiO2, their photocatalytic and catalytic properties, the influence of the nature of non-metal precursors, the ratio (X) titanium and non-metal precursors, calcination temperature (Тк) and other production conditions on these factors and their photocatalytic (PA) and catalytic activity, the synergistic effects were revealed. The dependence of changes in the anatase crystallites size, dopant percentage in the samples, the unit cell volume, texture parameters, and the dopants content on X and Тк was revealed. The qualitative and quantitative content of dopants, their state was determined, and their influence on the photocatalytic activity (PAvis, PAsolar) of these materials in the photooxidation processes of antibiotics and dyes was investigated. A universal system approach to the synthesis meso-nc-TiO2 with various morphologies has been developed. The azamacrocyclic cations Ni(II),Zn(II),Cu(II) structure-directing effect on the Pb(II),Bi(III),Cd(II) iodide clusters formation in hybrid organic-inorganic composite perovskites was studied. Based on spectral measurements, the possibility of using such materials as wide-band semiconductor has been shown. Based on a systematic study of the crystal structure of formed solvated Ni(II),Mn(II),Co(III),Cu(II),Zn(II),Cd(II) ions or azamacrocyclic cations Ni(II),Zn(II),Cu(II) with nitrogen or sulfur contain aromatic acids, the main types of intermolecular interactions were determined, which affect the components packing features in the crystal lattices, and their porosity was calculated. It was found that

Zn(II),Cd(II) coordination polymers are characterized by photoluminescence, which induced by electronic transitions in the bridging carboxylate ligand. Composites of macrocyclic Zn(II) complexes with organic dyes were obtained and established that the emission parameters of the dyes depend on the structure of the metal complex matrix.

Індекс УДК: 544, 546;54-386, 546, 546;54-386

Коди тематичних рубрик: 31.15, 31.17, 31.17.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Манорик Петро Андрійович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: фотокаталізатори на основі допованих неметалами наноструктури TiO2

Назва НТП англійською: nonmetal doped TiO2 nanostructures

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: хіімічна промисловість

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Доповані неметалами (C, N, F, S) наноструктури TiO2, які здатні проявляти фотокаталітичну активінсть в процесах деградації органічних сполук при опроміненні світлом видимого діапазону

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Романовская Н.И., Манорик П.А., Селищев А.В., Ермохина Н.И., Яремов П.С., Гребенников В.Н., Щербаков С.Н., Д.Р.Т.Цан/ Влияние модифицирования TiO2 тиомочевиной на его фотокаталитическую активность в процесах деградации доксициклина. // Теорет. и эксперим. химия. – 2020. – 56(3). - С. 172-180. https://doi.org/10.1007/s11237-020-09650-6

2. Romanovska N.I., Manoryk P.A., Selyshchev O.V., Yaremov P.S., Shylzshenko O.V., Terebilenko A.V., Shcherbakov S. M., Zahn D.R.T. Influence of calcination temperature on structural-dimensional characteristics of C,S-doped TiO2 nanostructures and their photocatalytic activity in the ceftazidime and doxycycline photodegradation

processes. // Ukrainian Chemistry journal – 2020. – 86, №10. – C.95 – 119. doi: 10.33609/2708-129X.86.10.2020.95-119.

3. Grebennikov V.N., Leonenko E.A., Manorik P.A., Romanovska N.I., Kobylinska N.G., Shulzhenko A.V. The influence of super paramagnetic Fe3O4 nanoparticles on spectral and luminescent properties of mesostructured SiO2/P123/Rh6G/Fe3O4 films formed in stationary magnetic fields // Ukrainian Chemistry journal, 2020, V. 86, No2- p.78-96. DOI: 10.33609/0041-6045.86.2.2020.78-96

4. Gavrish S.P., Shova S., Cazacu M., Dascalu M., Lampeka Ya. D. Syntheses and crystal structures of the one-dimensional coordination polymers formed by [Ni(cyclam)]2+ cations and 1,3-bis(3-carboxypropyl)-tetramethyldisiloxane anions in different degrees of deprotonation // Acta Crystallogr. Sect. E.- 2020.- V. E76, N3.- P.446-451. doi: 10.1107/S2056989020002327

5. Gavrish S.P., Shova S., Cazacu M., Lampeka Ya. D. A 2D coordination polymer assembled from a nickel(II) tetraazamacrocyclic cation and 4,4¤-(dimethylsilanediyl)-diphthalate(3-) linker // Acta Crystallogr. Sect. C.- 2020. - V. C76, N5.- P.419-426. https://doi.org/10.1107/S2053229620005008

6. Gavrish S.P., Shova S., Cazacu M., Lampeka Ya. D. Crystal structure of the one-dimensi-onal coordination polymer formed by the macrocyclic [Ni(cyclam)]2+ cation and the dianion of diphenylsilanediyl¬bis(4-benzoic acid) // Acta Crystallogr. Sect. E.- 2020.- V. E76, N6.- P.929-932. doi: 10.1107/S2056989020006544

7. N. I. Ermokhina, V. V. Shvalagin, N. I. Romanovska, P. A. Manoryk, R. Yu. Barakov, M. O. Kompanets, V. I. Sapsay, D. O. Klymchuk, A. M. Puziy. Synthesis and characterization of diferent binary and ternary phasemixtures of mesoporous nanocrystalline titanium dioxide.//SN Applied Sciences 2021, 3:491 https://doi.org/10.1007/s42452-021-04474-y

8. Н.И.Романовская, П.А.Манорик, В.С.Воробец. Г.Я.Колбасов, Н.И.Ермохина, Я.В.Кишеня, С.А.Сотник ,П.С.Яремов, А.В.Полищук. Влияние условий синтеза на фотоэлектрохимические и электрокаталитические свойства TiO2-наноструктур и TiO2-Au-нанокомпозитов //Электронная обработка материалов, - 2021.- 57(4), 1-14, https://doi.org/10.52577/eom.2021.57.4.01

9. L. V. Tsymbal, I. L. Andriichuk, S. Shova, D. Trzybiński, K. Woźniak, V. B. Arion, Ya. D. Lampeka Coordination polymers of the macrocyclic nickel(II) and copper(II) complexes with isomeric benzenedicarboxylates: the case of spatial complementarity between the bis-macrocyclic complexes and o-phthalate / Cryst. Growth Des., - 2021. - V.21, N4, p. 2355-2370. https://dx.doi.org/10.1021/acs.cgd.1c00011

10. S. P. Gavrish, S. Shova, Ya. D. Lampeka Crystal structures of Zn(cyclam)I2 (second monoclinic polymorph) and Zn(cyclam)I(I3) // Acta Crystallogr. Sect. E, E77, - 2021 - P.1185–1189. https://doi.org/10.1107/S2056989021011166

11. Romanovska N.I., Manoryk P.A., Yaremov P.S., Byeda O.A., Pershina K.D., Kazdobin K.A. Direct changing of structural, morphological and Electrochemical Properties of the Sulfur-doped nano TiO2 // Materials Today: Proceedings. – 2022. - V50, Part 4. – P. 435-441. https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.11.246

12. Романовська Н.І., Гребенніков В.М., Шульженко О.В., Яремов П.С., Селищев О.В., Цан Д.Р.Т., Манорик П.А. Вплив умов отримання C,N,F-TiO2 наноструктур на їх фотокаталітичну активність в процесі фотодеградації доксицикліну.//Теорет. та эксперим. хімія. – 2022. – 58, №1. – С.35 – 41. https://doi.org/10.1007/s11237-022-09720-x

13. Ermokhina N., Korzhak A., Klymchuk D., Puziy A., Grebennikov V., Romanovska N., Shulzhenko O., Manorik P. Photocatalytic activity of mesoporous TiO2 (anatase) in the reaction of hydrogen release from aqueous-ethanolic mixture // Ukrainian Chemistry Journal. – 2022. – 88, №4. – P. 94-112. https://doi.org/10.3103/S1068375522010094

14. S. P. Gavrish, S. Shova, Ya. D. Lampeka Crystal structure of poly[(μ6-benzene-1,3,5-tricarboxylato)tris(1-methylpyrrolidin-2-one)nitratodizinc(II)] / Acta Crystallogr. Sect. E, 2022, v. E78, N12, p.1253-1256. https://doi.org/10.1107/S2056989022011045

15. S. P. Gavrish, S. Shova, Ya. D. Lampeka Syntheses and structural characterizations of the first coordination polymers assembled from the Ni(cyclam)2+ cation and the benzene-1,3,5-tricarboxylate linker / Acta Crystallogr. Sect. E, 2022, v. E78, N11, p. 1122-1126. https://doi.org/10.1107/S2056989022009860

16. L. V. Tsymbal, V. B. Arion, Ya. D. Lampeka Synthesis and crystal structure of trans-diaqua-(1,4,8,11-tetraazaundecane)copper(II) isophthalate monohydrate / Acta Crystallogr. Sect. E, 2022, v. E78, N8, p. 851-854. https://doi.org/10.1107/S2056989022007538

17. L. V. Tsymbal, R. Ardeleanu, S. Shova, Ya. D. Lampeka Synthesis and crystal structure of bis[transdiaqua(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane-□4N1,N4,N8,N11)nickel(II)] trans-(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane-□4N1,N4,N8,N11)bis[4,4′,4′′-(1,3,5-trimethylbenzene-2,4,6-triyl)tris(hydrogen phenylphosphonato)]nickel(II) decahydrate / Acta Crystallogr. Sect. E, 2022, v. E78, N7, p. 750-754. https://doi.org/10.1107/S2056989022006624

18. L. V. Tsymbal, I. L. Andriichuk, V. Lozan, S. Shova, Ya. D. Lampeka Synthesis and crystal structure of diaqua(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane)zinc(II) bis(hydrogen 4-phosphonatobiphenyl-4□-carboxylato)(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane)zinc(II) / Acta Crystallogr. Sect. E, 2022, v. E78, N6, p. 625-628. https://doi.org/10.1107/S2056989022004534

19. R. I. Gurtovyi, S. P. Gavrish, L. V. Tsymbal, M.-O. Apostu, M. Cazacu, S. Shova, Ya. D. Lampeka 2D coordination polymers and ionic complexes of the nickel(II) and zinc(II) cyclam cations with trigonal carboxylate linkers based on triazine core. Crystal structures, supramolecular catenation and spectral characterization / Polyhedron, 2022, v.221, 115870 (12 p.p.). https://doi.org/10.1016/j.poly.2022.115870

20. L. Andriichuk, S. Shova, Ya. D. Lampeka Crystal structures of the complexes containing macrocyclic cations [M(cyclam)]2+ (M = Ni, Zn) and tetraiodidocadmate(2−) anion / Acta Crystallogr. Sect. E, 2023, v. E79, N9, p.821-826. https://doi.org/10.1107/S2056989023007004

21. Lishchenko, Y.L., Sotnik, S.O., Volochnyuk, D.M. et al. Catalytic reactions of epoxides and aziridines with carbon dioxide in the presence of salen-type complexes of 3d metals. // Chem Heterocycl Comp. – 2023. – 59. – P. 341–356 doi.org/10.1007/s10593-023-03204-z

22. Романовська Н.І., Гребенніков В.М., Шульженко О.В., Яремов П.С., Коржак А.В., Манорик П.А., Кучмій С.Я. Вплив кислотності поверхні кодопованих C,S-TiO2 наноструктур на їх фотокаталітичні властивості в процесах виділення водню і окиснення етанолу. // Теорет. і експер. хімія. – 2023. 60, 4.С. 227-233.

23. Трипольський А.І., Єрмохіна Н.І., Гребенніков В.М., Климчук Д.О., Космамбетова Г.Р., Діденко О.З., Манорик П.А. Вплив структури поверхні нанокристалітів діоксиду титану на їх каталітичні властивості в реакції перетворення спиртів // Теорет. і експер. хімія. – 2023. 60, 4.С. 240-246.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кошечко Вячеслав Григорович
д. х. н., 02.00.04

Перелік осіб-виконавців

Єрмохіна Наталія Іванівна
(к. х. н.)

Андрійчук Ірина Леонідівна
(к. х. н.)

Гавриш Сергій Павлович
(к. х. н., 02.00.01)

Гребенніков Володимир Миколайович
(к. х. н., 02.00.01)

Лампека Ярослав Дмитрович
(д.х.н.)

Романовська Наталія Іванівна
(к.х.н., 02.00.04)

Сотнік Світлана Олександрівна
(к.х.н.)

Тверсков Олександр Юрійович

Цимбал Людмила Володимирівна
(к. х. н., 02.00.01)

Шульженко Олександр Васильович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Железнякова Галина Яківна

Телефон

+38 (044) 525-66-70

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

