Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U001195

Державний реєстраційний номер: 0116U002521

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-01-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Поліоксомолібдати та поліоксовольфрамати у водних, водно-органічних і фізіологічних розчинах. Ізоморфні заміщення у твердих розчинах оксомолібдатів лантанідів

Початок етапу: 01.2016

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітного документа: Проміжний звіт

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.): 291.65

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:

Проведене системне вивчення комплексоутворення в розчинах гетерополіметалоніколат-аніонів дало змогу запропонувати моделі, що описують стан іонів в розчинах Ni2+ - MoO42- - H+(Z = 1,00) - H2O та побудувати діаграми розподілу в інтервалі кислотності Z= ?(H+) / ?(MoO42-) = 0,6?2,5, що дають змогу встановити оптимальні області Z для синтезу солей із необхідним аніоном; розрахувати логарифми концентраційних і термодинамічних констант утворення (lgKC, lgK0) й стандартні енергії Гіббса утворення ?G0f гетерополіаніонів зі структурою Андерсона, що дають змогу оцінити термодинамічну можливість реакцій у схемах стану гексаметалонікелатів у водному розчині. Встановлено, що збільшення електропровідності при заміщенні Неодиму на Самарій у структурі Nd5Mo3O16 обумовлено викривленням кристалічної структури флюориту в тому ж напрямку, що й при переході від структури CaF2 до структури Nd5Mo3O16. Отриманий результат може бути корисний при пошуку нових твердих електролітів в подібних сполуках. Вперше синтезовано та охарактеризовано методами хімічного аналізу, РФА та ІЧ-спектроскопії церій (III)-вмісні поліоксовольфрамати Na9[Ce(W5O18)2]·31H2O, Ce2W7O24?20H2O, Ce5[HW7O24]3?56H2O, Ce10[W12O40(OH)2]3?94H2O, Na10Ce20[W12O40(OH)2]7?180H2O, Na2Ce2[Ce2(H2O)10W22O72(OH)2]?35H2O. Визначено умови утворення купрум (II) паравольфрамату Б Cu5[W12O40(OH)2]?35H2O з рівноважного розчину за Z = 1.17 та з нерівноважного розчину за Z = 1.29. Визначено умови утворення подвійного натрій-купрум (II) паравольфрамату Б Na2Cu3(CuOH)2[W12O40(OH)2]·32H2O в результаті самозбирання в розчині Cu(NO3)2 - Na2WO4 - HNO3 - H2O. Хімічним, ІЧ-спектроскопічним і рентгеноструктурним аналізом встановлено утворення подвійної солі натрій-купрум (II) паравольфрамату Б Na2Cu4[W12O40(OH)2]·22H2O з рівноважного розчину за Z = 1.29. З використанням РСА проведено розшифровку монокристалів Na2Cu3(CuOH)2[W12O40(OH)2]·32H2O та Na2Cu4[W12O40(OH)2]·22H2O; результати рентгеноструктурних депоновано в Міжнародному банку структурних даних неорганічних сполук ICSD Fachinformationszentrum Karlsruhe, Germany в вигляді CIF-файлів. Виявлено новий структурний тип купрум (II)-вмісного паравольфрамату Б із оригінальним катіонним, аніонним впорядкуванням та порожнинами в структурі та трьома типами координаційних поліедрів атомів Cu.

Реферат англійською:

A systematic study of complex formation in heteropoly metalonickelate-anions solutions allowed us to propose a model that describes the state of ions in solutions of Ni2+-MoO42--H+(Z=1,00)-H2O and build distribution diagrams in the range of acidity Z=?(H+)/?(MoO42-)=0.6-2.5, allowing to establish the optimum Z area for the synthesis of salts with the necessary anion; calculate the logarithms of the concentration and thermodynamic formation constants (lgKs, lgK0) and standard Gibbs energy ?G0f for the reactions of formation of heteropoly anions with Anderson structure. Substitution neodymium for samarium in the compounds Nd5Mo3O16 has been investigated by X-ray diffraction, IR-spectroscopy, scanning electron microscopy. It was shown that solid solution Nd5-xSmxMo3O16 with fluorite-related structure is formed in the range up to x=3. Specific conductivity increase with increasing of samarium containing in the range up to x=1. Crystal structure refinement of Nd4SmMo3O16 by Rietveld method showed, that the Nd(2) polyhedron is distorted more, than the one in the Nd5Mo3O16 structure. Cerium (III)-containing polyoxotungstates Na9[Ce(W5O18)2]·31H2O, Ce2W7O24?20H2O, Ce5[HW7O24]3?56H2O,

Ce10[W12O40(OH)2]3?94H2O, Na10Ce20 [W12O40(OH)2]7?180H2O, Na2Ce2[Ce2(H2O)10W22O72(OH)2]?35H2O synthesized for the first time and characterized by chemical analysis, XRD and infrared spectroscopy. The conditions for the synthesis of copper (II) paratungstate B Cu5[W12O40(OH)2]·35H2O from the equilibrium solution at Z=1.17 and from non-equilibrium solution at Z=1.29 were elaborated. The conditions for the formation of a double sodium-copper (II) paratungstates B Na2Cu3(CuOH)2[W12O40(OH)2]·32H2O and Na2Cu4[W12O40(OH)2]·22H2O as a result of self-assembly in solution of Cu(NO3)2-Na2WO4-HNO3-H2O were established. The results of X-ray single crystal studying of (CuOH)2[W12O40(OH)2]·32H2O and Na2Cu4[W12O40(OH)2]·22N2O monocrystals were deposited in the International Crystal Structural Database for inorganic compounds ICSD Fachinformationszentrum Karlsruhe, Germany as a CIF-files. A new structural type of copper (II) -containing paratungstate B with original cationic, anionic ordering and cavities in the structure with three types of coordination polyhedra of Cu atoms was found.

Індекс УДК: 547, 546(776:786):546.65+539.26+544.313.2

Коди тематичних рубрик: 31.21

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: Методика синтезу ізоструктурних гетерополісполук Na9[Ln(W5O18)2]*35H2O (Ln = Er, Gd)

Назва НТП англійською: Procedure for the synthesis of isostructural heteropoly compounds Na9[Ln(W5O18)2]*35H2O (Ln=Er, Gd)

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Методика синтеза лантанід-вмісних гетерополідекавольфраматів із водного розчину з використанням стехіометричної кількості реактантів і ацетону в якості висолюючого агенту. Дозволяє отримати цільовий продукт у вигляді порошків Na9[Ln(W5O18)2]*35H2O (Ln=Er, Gd) із розміром зерен 200-450нм, або у вигляді ігольчастих кристалів. Методика може бути використана для отримання люмінофорів на основі лантанідів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2016, ДонНУ імені Василя Стуса, акт 09-16/12.0-24 від 14.12.2016р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: науково-дослідні інститути, вищі навчальні заклади, підприємства з виготовлення люмінофорів

Перспективні ринки: ринок освітніх послуг України та світу, ринок люмінофорів

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 200

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 650

Очікуваний термін окупності (років): 3

Додаткова інформація: невиключна ліцензія-

Назва НТП українською: Діаграми стану гетерополіаніонів Вольфраму (VI) та Молібдену (VI) у водних розчинах

Назва НТП англійською: Diagrams of heteropoly anions of Tungsten (VI) and Molybdenum (VI) distribution in aqueous solutions

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Діаграми стану гетерополіаніонів Вольфраму (VI) та Молібдену (VI) у водних розчинах впроваджено у 2016 році у навчальний процес кафедри неорганічної хімії хімічного факультету ДонНУ імені Василя Стуса шляхом використання в розділах "Хімічний зв'язок", "Електролітична дисоціація", "Фізичні та хімічні властивості розчинів електролітів", навчального посібника "Основи хімії та біогеохімії: навчальний посібник" / Г.М. Розанцев, К.В. Борисова, К.Є. Білоусова. - Вінниця: ДонНУ, 2016. -224 с. при викладанні нормативної дисципліни "Хімія неорганічна" та "Хімія з основами біогеохімії" для студентів денної форми з нормативним та прискореним терміном навчання І курсу біологічного факультету ступеня освіти "Бакалавр".

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2016, ДонНУ імені Василя Стуса, акт 08-16/12.0-24 від 14.12.2016р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: науково-дослідні інститути, вищі навчальні заклади

Перспективні ринки: ринок освітніх послуг України та світу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 70

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 100

Очікуваний термін окупності (років): 6

Додаткова інформація: невиключна ліцензія-

IX. Бібліографічний опис

I. Статті - 5: 1.Isomorphous Substitution of Rare-Earth Elements in Lacunary Apatite Pb8Na2(PO4)6 / E.I. Get'man, S.N. Loboda, A.V. Ignatov, V.V. Prisedsky, M.A.B. Abdul Jabar, L.I. Ardanova // Inorg. Chem. -2016. -Vol. 55, № 5. -P. 2165-2173. (DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b02571) (Impact factor 4,82). 2.pH-Metric Studies on the Interaction of Ni-Containing Anderson Type Heteropolyanions in Aqueous Solution / N.I. Gumerova, A.V. Notich, G.M. Rozantsev, S.V. Radio // Journal of Solution Chemistry. - 2016. -Vol. 45, № 6. -P. 849-860. (DOI: 10.1007/s10953-016-0471-0) (Impact factor 1,664). 3.Gumerova N.I. [Ni(OH)3W6O18(OCH2)3CCH2OH]4-: the first tris-functionalized Anderson-type heteropolytungstate / N.I. Gumerova, A. Roller, A. Rompel // Chem. Commun. -2016. -Vol. 52. -P. 9263-9266.

(DOI: 10.1039/C6CC04326G). (Impact factor 6,567). 4.Isomorphous substitutions and conductivity in molybdates Nd5?xLnxMo3O16+y (y?0.5), where Ln = La, Ce, Pr / E.I. Get'man, K.A. Chebyshev, L.V. Pasechnik, L.I. Ardanova, N.I. Selikova, S.V. Radio // Journal of Alloys and Compounds. -2016. - Vol. 686. -P. 90-94. (DOI: 10.1016/j.jallcom.2016.06.005). (Impact factor 3,014). 5.Gumerova N.I. Synthesis and Characterization of the First Nickel(II)-Centered Single-Side Tris-Functionalized Anderson-Type Polyoxomolybdate / N.I. Gumerova, A. Roller, A. Rompel // European Journal of Inorganic Chemistry First published: 30 November 2016. (DOI: 10.1002/ejic.201601198). (Impact factor 2,686). II.Тези доповідей - 10: 1.Дидик С.А., Кашуба А.И., Гумерова Н.И., Розанцев Г.М., Радио С.В. Термодинамические характеристики реакций образования гетерополигексамолибдоникелат (II) анионов // IX Українській науковій конференції студентів, аспірантів і молодих учених "Хімічні проблеми сьогодення", Вінниця, 29-30 березня 2016 р. -ДонНУ. -с. 69. 2.Іванцова Е.С., Усачов О.М., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Взаємодія цинку (II) сульфату з підкисленими водними розчинами натрію вольфрамату // IX Українській науковій конференції студентів, аспірантів і молодих учених "Хімічні проблеми сьогодення", Вінниця, 29-30 березня 2016 р. -ДонНУ. -с. 71. 3.Марійчак О.Ю., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Синтез і кристалічна структура солей із гетерополідекавольфрамосамарат(III)-аніоном, [Sm(W5O18)2]9- // IX Українській науковій конференції студентів, аспірантів і молодих учених "Хімічні проблеми сьогодення", Вінниця, 29-30 березня 2016 р. -ДонНУ. -с. 79. 4.Усачев О.М., Шульжук Б.В., Куценко Н.В., Розанцев Г.М. Структурные фраменты для расчета энергии гиббса образования изополифольврамат - анионов // IX Українській науковій конференції студентів, аспірантів і молодих учених "Хімічні проблеми сьогодення", Вінниця, 29-30 березня 2016 р. -ДонНУ. -с. 93. 5.Иванцова Э.С., Радио С.В. Соли меди (II) с анионом паравольфрамата Б: синтез, ИК-спектроскопический анализ и кристаллическая структура // XXVI Менделеевская конференция молодых ученых: сборник тезисов (17-23 апреля 2016 г., Самара). - Самара: СамГТУ, 2016. - С. 11. 6.Марийчак А.Ю., Розанцев Г.М., Радио С.В. Гетерополидекавольфрамотулиат(III) натрия: синтез, кристаллическая структура и свойства // XII Всеукраїнська конференція молодих вчених та студентів з актуальних питань хімії. Збірка праць (11-13 травня 2016 року) - м. Харків: Ексклюзив, 2016. - С. 49. 7.Пойманова Е.Ю., Розанцев Г.М., Белоусова Е.Е., Медведь А.О. Термодинамические и кинетические аспекты образования изополивольфрамат-анионов в водно-органических растворах // VI Международная научная конфернция "Химическая термодинамика и кинетика": Сборник научных трудов. - Тверь, Тверской государственный университет, 2016. - С. 209. 8.Ivantsova E.S., Radio S.V. Crystal Structure of Double Sodium-Copper (II) Paratungstate B: Na2Cu3(CuOH)2[W12O40(OH)2]·32H2O // 1st Inter-University Students Scientific Conference "Topical Issues of Humanities, Technical and Natural Sciences" (17 October 2016): Book of Abstracts. - Vinnytsia: DonNU, 2016. - P.47-49. 9.Mariichak O., Diubanov V., Radio S. Y-, Sm-, and Er-Containing Heteropoly Tungstates With Peacock-Weakley Anion: Synthesis, Structure, and Surface Micromorphology // VI Міжнародний молодіжний науковий форум "Litteris et Artibus" / Матеріали. - Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2016. - 1 електрон. опт. диск (CD-ROM). Об'єм даних у мегабайтах 98 Мб. - С. 358-359. 10.Gumerova N.I., Roller A., Rompel A. The first tris-functionalized Anderson-type heteropolytungstate // VI Міжнародний молодіжний науковий форум "Litteris et Artibus" / Матеріали. - Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2016. - 1 електрон. опт. диск (CD-ROM) - С. 388-389.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Проректор з наукової роботи Хаджинов Ілля Васильович

Перелік осіб-виконавців

Іванцова Елла Сергіївна

Арзамасцева Тетяна Олександрівна

Баумер Вячеслав Миколайович

Борисова Катерина Володимирівна

Гетьман Євген Іванович

Гумерова Надія Ісмагілівна

Марійчак Олександра Юріївна

Радіо Сергій Вікторович

Розанцев Георгій Михайлович

Сугаков Андрій Сергійович

Усачов Олег Михайлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

