Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U003938

Державний реєстраційний номер: 0119U100025

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-07-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Ізополі- та гетерополісполуки з катіонами 3d-металів і лантанідів та оксіортосилікати лантанідів

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Остаточний 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: вул. 600-річчя, 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380432508930

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, буд. 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.): 758.603

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Поліоксометалати, ортованадати та оксіортосилікати перехідних металів і лантанідів для створення новітніх матеріалів

Назва роботи англійською:

Polyoxometalates, orthovanadates and oxyorthosilicates of transition metals and lanthanides for creation of new materials

Реферат українською:

Систематизовано результати рентгеноструктурного аналізу монокристалів ізоструктурних середніх солей Na9[Ln(W5O18)2]·nH2O із гетерополівольфрамат-аніоном зі структурою Пікока–Уіклі. Встановленням структурних параметрів у ряду ізоструктурних середніх солей Na9[Ln(W5O18)2]·35H2O (Ln – гетероатом-лантаноїд) встановлено лінійну величину зменшення у зменшенні довжини зв'язку Ln—Ob(W) та міжатомних відстаней O…O у поліедрі {LnO8} в гетерополіаніоні зі структурою Пікока–Уіклі дра Ln(III)–гетероатома. Методом pH-потенціометричного титрування досліджено взаємодію у водному розчині WO42−, який містить Mn2+ та підкислень до Z = 1,00, із наступним математичним моделюванням за програмою CLINP 2.1. Підібрано модель рівноваги, яка включає до свого складу йонні пари [MnOH+, W12O40(OH)2]9−; [Mn2+, W12O40(OH)2]8−; [Mn2+, HW12O40(OH)2]7−; [Mn2+, H2W12O40(OH)2]6−; [Mn2+, H3W12O40(OH)2]5−. Розраховані для моделі значення логарифмів концентраційних констант утворення йонних пар були основою для розрахунку логарифмів термодинамічних констант за допомогою методу Пітцера. У рамках кристалоенергетичної теорії ізоморфних заміщень В.С.Урусова розраховано енергію змішування (взаємодія параметрів) у системах (Lu1–xLnx)[(SiO4)0.5O0.5], де Ln – рідкоземельні елементи (РЗЕ) ряду La–Yb, та (Sc1–xLnx)[(SiO4)0.5O0.5], де Ln –Р. ЗЕ ряду Tb–Lu та Y. Отримано залежність від температури розпаду твердих розчинів від номера РЗЕ та відповідно (x), з використанням яких побудовано діаграму термодинамічної стабільності твердих розчинів, яка дозволяє також прогнозувати межі заміщення залежно від температури або температури розпаду за заданими границями заміщення. Результати роботи можуть бути корисними під час вибору складу компонентів у матрицях та кількості активатора (допанту) у нових люмінесцентних, лазерних та інших матеріалах на основі низькотемпературних модифікацій твердих розчинів «змішаних» оксіортосилікатів РЗЕ.

Реферат англійською:

The results of X-ray structural analysis of single crystals of isostructural Na9[Ln(W5O18)2]·nH2O normal salts with heteropoly tungstate anion with Peacock–Weakley structure are systematized. By establishing the structural parameters in a series of isostructural normal salts Na9[Ln(W5O18)2]·35H2O (Ln is a lanthanide heteroatom), a linear decrease in the length of the Ln—Ob(W) bond and interatomic distances O…O in the {LnO8} polyhedron in the heteropoly anion with the Peacock–Weakley structure of the Ln(III)–heteroatom was established. The interaction in an aqueous solution of WO42− containing Mn2+ and acidifications up to Z=1.00 was investigated using the pH-potentiometric titration method, followed by mathematical modeling using the CLINP 2.1 program. An equilibrium model was selected, which includes ion pairs [MnOH+, W12O40(OH)2]9−; [Mn2+, W12O40(OH)2]8−; [Mn2+, HW12O40(OH)2]7−; [Mn2+, H2W12O40(OH)2]6−; [Mn2+, H3W12O40(OH)2]5−. The values of the logarithms of the ion pair formation concentration constants calculated for the model were the basis for calculating the logarithms of the thermodynamic constants using the Pitzer method. Within the framework of V.S.Urusov's crystal energetic theory of isomorphic substitutions, the energy of mixing (interaction of parameters) was calculated in the systems (Lu1–xLnx)[(SiO4)0.5O0.5], where Ln are rare earth elements (REEs) of the La–Yb series, and (Sc1–xLnx)[(SiO4)0.5O0.5], where Ln is REEs of the Tb–Lu and Y series. The dependence of the decomposition temperature of solid solutions on the REEs number and, respectively, (x) was obtained, using which a diagram of

the thermodynamic stability of solid solutions was constructed, which also allows predicting the substitution limits depending on the temperature or the decomposition temperature at the specified substitution limits. The results of the work can be useful when choosing the composition of components in matrices and the amount of activator (dopant) in new materials.

Індекс УДК: 546;54-386, 546.2, 546.2, 54-386, 546.786+546.776+546.65+548.73+546.05

Коди тематичних рубрик: 31.17, 31.17.15.25, 31.17.15.31, 31.17.29.05

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: Спосіб одержання Манган(II)–вмісного поліоксовольфрамату

Назва НТП англійською: The procedure of Manganese(II)-containing polyoxotungstate obtaining

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 85.42 Вища освіта; 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено методику синтезу кристалічного подвійного натрію-мангану(II) паравольфрамату Б $Na_8Mn[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 34H_2O$, яка дозволяє одержувати однофазну середню сіль. Спосіб одержання кристалічної солі подвійного натрію-мангану(II) паравольфрамату Б $Na_8Mn[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 34H_2O$, який включає послідовне додавання розчинів натрію вольфрамату, ацетатної кислоти й мангану(II) хлориду у мольному відношенні 6:6:1, витримування кристалів у маточному розчині у щільно закритій хімічній склянці за 20–25°C упродовж 48 годин, фільтрування, промивання охолодженою до 3°C дистильованою водою, висушування на повітрі за 20–25°C протягом 24 годин.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів, Розроблення екологічно безпечної методики синтезу, яка відповідає принципам "зеленої" хімії

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: заклади вищої освіти, наукові установи, виробники хімічної продукції

Перспективні ринки: Ринок освітніх послуг, Ринок матеріалів хімічної промисловості

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:

Назва НТП українською: Параметри взаємодії у системах оксіортосилікатів лантаноїдів

Назва НТП англійською: Interaction parameters in lanthanide oxyorthosilicate systems

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук; 85.42 Вища освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У расках кристалоенергетичної теорії ізоморфних заміщень В.С. Урусова розраховано енергії змішування (параметри взаємодії) у системах (Lu1–xLnx)[(SiO4)0.5O0.5], де Ln – рідкісноземельні елементи (РЗЕ) ряду La–Yb, та (Sc1–xLnx)[(SiO4)0.5O0.5], де Ln –РЗЕ ряду Tb–Lu та Y. Отримано залежності температур розпаду твердих розчинів від номеру РЗЕ та складу (x), з використанням яких побудовано діаграму термодинамічної стабільності твердих розчинів, яка дозволяє також прогнозувати границі заміщень залежно від температури або температуру розпаду за заданими границями заміщень. Результати роботи можуть бути корисними під час вибору співвідношення компонентів у матрицях та кількості активатора (допанту) у нових люмінесцентних, лазерних та інших матеріалах на основі низькотемпературних модифікацій твердих розчинів «змішаних» оксіортосилікатів РЗЕ.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення рівня підготовки студентів закладів вищої освіти

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: наукові установи, виробники хімічних матеріалів

Перспективні ринки: ринок хімічної продукції

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

Get'man E.I., Radio S.V. Predicting Phase Stability of Materials Based on (Sc1–xLnx)[(SiO4)0.5O0.5], Ln = Tb – Lu and Y Solid Solutions. In: Fesenko O., Yatsenko L. (eds) Nanomaterials and Nanocomposites, Nanostructure Surfaces, and Their Applications. Springer Proceedings in Physics. – Springer, Cham. –2021. – Vol. 246. – P.569–578. https://doi.org/10.1007/978-3-030-51905-6_39

Get'man E. I., Oleksii Yu.A., Kudryk O.V., Radio S.V., Ardanova L.I. Predicting the stability of orthoarsenates Lu1–xLnxAsO4, Ln = Sm–Yb, Sc, Y, and La1–xLnxAsO4, Ln = Ce, Pr, Nd solid solutions. Springer Proceedings in Physics. – Springer, Cham. –2021. – Vol. 263. – P. 3–11. https://doi.org/10.1007/978-3-030-74741-1_1

Duvanova E.S., Mariichak O.Yu., Baumer V.N., Rozantsev G.M., Radio S.V. Crystal Structure of Double Sodium–Copper (II) Paratungstate B, Na2Cu4[W12O40(OH)2]·22H2O, and Mixed Copper (II) Paratungstate B–Hydroxide, Cu5[W12O40(OH)2]·2Cu(OH)2·30H2O // Journal of Structural Chemistry. – 2021. – Vol. 62, No. 3. – P. 379-389. https://doi.org/10.1134/S0022476621030045

Duvanova E.S., Popova A.V., Rysich A.V., Radio S.V., Rozantsev G.M. Synthesis of Mn(II)-containing paratungstate B from aqueous solutions acidified by acetic acid // Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii. – 2021. – No. 2. – P. 39–48. http://dx.doi.org/10.32434/0321-4095-2021-135-2-39-48

Kudryk O., Bisikalo O., Oleksii Yu., Radio S. Intelligent Information System for Predicting Chemicals with Interactive Possibilities // COLINS-2021: 5th International Conference on Computational Linguistics and Intelligent Systems, April 22–23, 2021, Kharkiv, Ukraine. – P. 901–915. http://ceur-ws.org/Vol-2870/paper68.pdf

Get'man E.I., Oleksii Yu.A., Radio S.V. Predicting the stability of orthoarsenates Sc1–xLnxAsO4 and TbxLn1–xAsO4 solid solutions // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології / Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii. – 2021. – Vol. 19, No. 2. – P. 287–296.
https://www.imp.kiev.ua/nanosys/media/pdf/2021/2/nano_vol19_iss2_p0287p0296_2021.pdf
https://doi.org/10.15407/nnn.19.02.287

Термодинамічні та кінетичні аспекти хімічних реакцій: навч. посіб. / уклад. О.М. Швед, К.С. Ютілова, С.Л. Богза, Г.М. Розанцев. Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса, 2021. 144 с. (8,37 ум.-д.а.). https://cutt.ly/fwpGQWsq

1. Duvanova E., Radio S., Rozantsev G. Interaction of Copper(II) with acidified sodium ortotungstate aqueous solutions // Open Readings 2021. 64th International Conference for Students of Physics and Natural Sciences. March 16–19, 2021. Abstract book. Vilnius, LITHUANIA. – P. 391.
http://www.openreadings.eu/thesismanager/thesis21/430Duvanova.pdf

Mariichak O., Rozantsev G., Radio S. Synthesis and crystal structures of Samarium(III)-containing heteropoly salts with Peacock–Weakley type anion Na9–xHx[Sm(W5O18)2]·nH2O // 64th International Conference for Students of Physics and Natural Sciences. March 16–19, 2021. Abstract book. Vilnius, LITHUANIA. – P. 434.
http://www.openreadings.eu/thesismanager/thesis21/905Mariichak.pdf

Дремлюга А.В., Дуванова Е.С., Кордиш О.М., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Синтез паравольфрамату Б кадмію // Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2021): збірник тез доповідей IV Міжнародної (XIV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 23–25 березня 2021 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О.М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. – Вінниця, 2021. – С. 53.

Mariichak O.Yu., Rozantsev G.M., Radio S.V. New Lu(III)-containing heteropoly salt with Peacock–Weakley type anion Na9[Lu(W5O18)2]·42H2O: Synthesis and crystal structure // Current chemical problems (CCP-2021): book of abstracts of the IV International (XIV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 23–25, 2021, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O.M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2021. – P. 60.

Печаліна Є.І., Дуванова Е.С., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Взаємодія в розчині Cu2+ – WO42– (Z = 1,17) – H+/OH– – H2O, (CW = 0,01 моль/л) // Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2021): збірник тез доповідей IV Міжнародної (XIV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 23–25 березня 2021 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О.М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. – Вінниця, 2021. – С. 65.

Марійчак О.Ю., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Синтез і кристалічна структура Na9[Er(W5O18)2]·32H2O // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (15 квітня 2021 року). Матеріали конференції. – Житомир: Видавець О.О. Євенок, 2021. – С. 173.

Олексій Ю.А., Рисіч А.В., Міщенко А.О., Марійчак О.Ю., Радіо С.В. Вплив катіонної підґратки на параметри будови ізополівольфрамат-аніону зі структурою Ліндквіста // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (15 квітня 2021 року). Матеріали конференції. – Житомир: Видавець О.О. Євенок, 2021. – С. 176.

Олексій Ю.А., Міщенко А.О., Рисіч А.В., Марійчак О.Ю., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Вплив катіонної підґратки на параметри будови декавольфрамат-аніону [W10O32]4– // Збірка тез доповідей XXII Міжнародної конференції студентів, аспірантів та молодих вчених «Сучасні проблеми хімії» (Київ, КНУ іменіТараса Шевченка, 19-21 травня 2021 р.). – Київ, 2021. – С. 73.

Марійчак О., Поповська О., Борисюк К., Розанцев Г., Радіо С. Гетерополісполуки з аніоном зі структурою Пікока–Уіклі: кристалічна структура, мікроморфологія поверхні, каталітичні та магнітні властивості // Збірник наукових праць: XVIII наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2021» (Львів, 31 травня - 2 червня 2021 р.). – Львів: Видавнитво від А до Я, 2021. – С. У20.

Дуванова Е.С., Рисіч А.В., Кордиш О.М., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Ізополівольфрамат-аніони у складі йонних пар за низької кислотності // Збірник наукових праць: XVIII наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2021» (Львів, 31 травня - 2 червня 2021 р.). – Львів: Видавнитво від А до Я, 2021. – С. Н13.

Пат. 149900. Спосіб одержання кристалічної солі подвійного натрію-мангану(II) поліоксовольфрамату. Дуванова Е.С., Розанцев Г.М., Радіо С.В. (Україна) Заявка u2021 01627 від 29.03.2021, МПК C01G 41/00, C01G 45/00 (2021.01), дата публікації 15.12.2021, Бюл. № 50. – 5 с. (Володілець: Донецький національний університет імені Василя Стуса, вул. 600-річчя, 21, м. Вінниця, 21021 (UA)).

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Хаджинов Ілля Васильович
д. е. н., 08.00.02

Перелік осіб-виконавців

Баумер Вячеслав Миколайович
(к. х. н., 02.00.04)

Гетьман Євген Іванович
(д.х.н., 02.00.01)

Дуванова Елла Сергіївна

Книжник Іван Андрійович

Кордиш Олексій Миколайович

Марійчак Олександра Юріївна

Олексій Юлія Анатоліївна

Попова Аліна Володимирівна

Радіо Сергій Вікторович
(к. х. н., 02.00.01)

Відповідальний за підготовку облікових документів

РАДІО Сергій Вікторович

Телефон

+38 (095) 397-43-17

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

