

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U002052

Державний реєстраційний номер: 0122U000656

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-02-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Дослідження окисно-відновних реакцій у системах $\text{Eu}_2\text{O}_3\text{-SiO (GeO)}$ спектроскопічними методами. Зіставлення отриманих експериментальних даних з результатами квантовохімічних розрахунків електронної будови МВОЗ, легованих іонами Cr(III) . Синтез біс-бензокраун-етерів), які містять в якості лінкерів фрагменти основ Трьогера, і вивчення їх комплексоутворення з солями органічних аміносполук. Дослідити можливість синтезу комплексів БМГЦ з f-металами та вивчити їх спектрально-люмінесцентні властивості. Побудова та верифікація QSAR/QSPR моделей для прогнозування властивостей наночастинок. Проведення позаекспериментального скринінгу властивостей нових наночастинок.

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

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, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1379.561

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові супрамолекулярні і наноструктурні системи на основі органічних і неорганічних сполук та їх гібридів: прогнозування, синтез та функціональні властивості

Назва роботи англійською:

New supramolecular and nanostructured systems based on organic and inorganic compounds and their hybrids: prognosis, synthesis and functional properties.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – комплексні сполуки біс(бензокраун-етерів) з фрагментом основи Трьогера, макрогетероцикли з ароматичними та гетероароматичними фрагментами, сесквіоксид Європію, монооксид Силіцію, комплекси Скандію, ресвератрол, іони Cr^{3+} в ортоборатах елементів III групи МВОЗ, нанорозмірні оксиди металів, QSAR методологія. Мета роботи – синтез та комплексоутворення біс(бензокраун-етерів) з фрагментом основи Трьогера, синтез ізомерних сполук дибензімідазо-краун-етерів, застосування йонів лантанідів для люмінесцентного визначення ресвератролу, аналіз впливу електронної будови сполук на люмінесцентні властивості йонів Cr^{3+} в ортоборатах елементів III групи, побудова та верифікація QSAR моделей для прогнозування цитотоксичності нанооксидів металів. Синтезовано крауновані основи Трьогера, що містять фрагменти бензо-15-краун-5, бензо-18-краун-6 і тетрафлуородибензо-18-краун-6 з вихідом 71–88%. Визначено константи стійкості комплексів біс(бензокраун-етерів) з хлоридами поліоксиетилендіамінів і деяких амінокислот. Циклізацією 1,3-біс-(бензо[d]імідазоліл-2-оксометил)бензолу з дитозилатами 1,2-, 1,3-, 1,4-біс-(2-гідроксиетокси)бензолу синтезовані відповідно 19-, 20-, і 21-членні цикли. Спектри дифузного відбиття продукту реакції ортосилікату Eu (II) свідчать на користь її перебігу. Термодинамічні розрахунки підтверджують можливість реакції за участю сполук елементів зі змінним валентним станом. Визначені спектральні характеристики ресвератролу. Розроблено методику твердофазного люмінесцентного визначення ресвератролу у виноградних винах та соках з застосуванням сорбату комплексу Sc(III) з ресвератролом та Брідж-35. Шляхом твердофазних реакцій отримано леговані іонами Cr^{3+} мікророзмірні ортоборати індію та скандію. У випадку високоенергетичного збудження люмінесценція йонів Cr^{3+} зумовлена рекомбінаційними процесами за участі вільних електронів і дірок. Розроблено методологію конструювання QSAR моделей для малих навчальних вибірок сполук.

Реферат англійською:

The object of the study includes complex compounds of bis(benzocrown ethers) containing a Tröger's base fragment; macroheterocycles with aromatic and heteroaromatic fragments; europium sesquioxide; silicon monoxide; scandium complexes with resveratrol; Cr^{3+} ions in orthoborates of group III elements; nanosized metal oxides; and QSAR methodology. The purpose of the work is the synthesis and investigation of the complexation of bis(benzocrown ethers) containing a Tröger's base fragment; the synthesis of isomeric dibenzimidazo-crown ether compounds; the use of lanthanide ions for the luminescent determination of resveratrol; the analysis of the influence of the electronic structure of compounds on the luminescent properties of Cr^{3+} ions in orthoborates of group III elements; and the construction and validation of QSAR models for predicting the cytotoxicity of metal nanooxides. Crowned Tröger's bases containing fragments of benzo-15-crown-5, benzo-18-crown-6, and tetrafluorodibenzo-18-crown-6 were synthesized with yields of 71–88%. The stability constants of complexes of bis(benzocrown ethers) with chlorides of polyoxyethylenediamines and selected amino acids were determined. Cyclization of 1,3-bis(benzo[d]imidazolyl-2-oxomethyl)benzene with ditosylates of 1,2-, 1,3-, and 1,4-bis(2-hydroxyethoxy)benzene afforded 19-, 20-, and 21-membered macrocycles, respectively. Diffuse reflectance spectra of the Eu(II) orthosilicate reaction product confirm the occurrence of the reaction, which is consistent with thermodynamic calculations for systems containing elements with variable valence states. The spectral

characteristics of resveratrol were determined, and a solid-phase luminescent method for its determination in grape wines and juices was developed using a sorbate of the Sc(III)–resveratrol complex with Brij® 35. Micron-sized indium and scandium orthoborates doped with Cr³⁺ ions were obtained by solid-state reactions.

Індекс УДК: 547.7/.8 , 547.898. 546.282/546.289:535.35/535.37:546.273:546.763

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Зінченко Віктор Федосійович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Молекулярні пінцети з фрагментами бензокраун-етерів і основи Трьогера.

Назва НТП англійською: Molecular tweezers with benzocrown ether fragments and Troeger bases.

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Основи Трьогера із фрагментами бензо-18-краун-6 та бензо-15-краун-5 утворюють з діамінами стійкі комплекси складу 1:1 й 2:1 відповідно. Основа Трьогера з 18-членними краун-етерними циклами при взаємодії з хлоридами лізину, який містить дві аміногрупи, та хлориду аргініну, який крім аміногрупи містить гуанідинову групу, утворює комплекси складу 1:1. Взаємодія біс(бензокраун-етерів), які містять в якості лінкерів фрагменти основ Трьогера, з солями органічних аміносполук дозволяє використовувати їх як рецептори комплексоутворення з солями амінокислот та аліфатичних діамінів.

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

Вплив НТП на довкілля: Не впливає

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Споживачі продукції: Хімічні підприємства

Перспективні ринки: Україна

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:

Назва НТП українською: Дослідні зразки легованих йонами Cr³⁺ ортоборатів Скандію та Індію MBO₃.

Назва НТП англійською: Experimental samples of Scandium and Indium orthoborates MBO₃ doped with ions Cr³⁺.

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Регулювання концентрації власних дефектів $\text{MBO}_3\text{:Cr}^{3+}$ ($\text{M} = \text{Sc, In}$) передбачає поліпшення світлотехнічних характеристик пи функціональних матеріалів. Високе значення квантового вихоу люмінесценції $\text{ScBO}_3\text{:Cr}^{3+}$ дозволяє практичне використання оптимізованого матеріалу як люмінофору ІЧ діапазону спектру для пристроїв оптоелектроніки.

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

Вплив НТП на довкілля: Не впливає.

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Споживачі продукції: Підприємства оптоелектроніки.

Перспективні ринки: Україна

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:

Назва НТП українською: Методологія конструювання QSAR моделей для малих навчальних вибірок сполук ($n < 50$ молекул). QSAR моделі для цитотоксичності нанорозмірних оксидів металів відносно *E. coli* та клітин HaCaT.

Назва НТП англійською: Methodology for the construction of QSAR models for small training sets of compounds ($n < 50$ molecules). QSAR models for the cytotoxicity of nanosized metal oxides toward *E. coli* and HaCaT cells.

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Методологія конструювання QSAR моделей для малих навчальних вибірок сполук передбачає розгляд індивідуальних молекул та їхніх парних комбінацій з іншими молекулами вибірки, що дозволяє

збільшити обсяг структурної інформації для побудови моделей, оскільки розмір навчальної вибірки зростає у $n(n+1)/2$ разів. Спосіб забезпечує більш повне представлення простору властивостей і може сприяти підвищенню стійкості та прогностичної здатності моделі за умов обмежених даних. Розширення малої вибірки за рахунок включення пар молекул, для яких використовуються середні значення властивостей індивідуальних молекул, що входять до пари, дає змогу значно підвищити прогностичну здатність моделей для позаекспериментального скринінгу функціональних властивостей різноманітних наночастинок

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

Вплив НТП на довкілля: Не впливає

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Споживачі продукції: Підприємства, що працюють у сфері розробки та впровадження нових біологічно-активних сполук

Перспективні ринки: Україна

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

O.I. Teslyuk, S.V. Beltyukova, O.O. Liventsova, S.V. Tsygankova, V.F. Zinchenko Luminescent Determination of Phytostilbene Resveratrol //Methods Objects Chem. Anal., 2025, 20(3), p. 228-234

<https://doi.org/10.17721/moca.2025.228-234>

Теслюк О.І., Циганкова С.В., Зінченко В.Ф. Спосіб кількісного визначення ресвератролу у винах та соках.

Патент України №1615639. Україна, МПК:G01N21/78 G01N33/14 - № u202501314, заявлено 26.03.2025, опубл. 17.12.2025, бюл. № 51/2025.

I. В. Березовська, О. В. Хоменко, С. В. Кулешов, О. К. Трунова, Н. П. Єфрюшина, В. П. Доценко. Синтез та люмінесцентні властивості легованих іонами Cr(III) мікро- та нанорозмірних ортоборатів Індію. // Вісник ОНУ. Хімія. 2024. Том 29, вип. 2(88), с.5-14. [https://doi.org/10.18524/2304-0947.2024.2\(88\).322125](https://doi.org/10.18524/2304-0947.2024.2(88).322125)

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

д. х. н., 05.14.06

Перелік осіб-виконавців

Єфрюшина Нінель Петрівна

(д. х. н., професор, пров.н.с., 02.00.02)

Іванов Юрій Едуардович

(к. х. н., с.н.с.)

Бабенко Антон Володимирович

Басок Степан Степанович

(к. х. н., с.н.с., 02.00.03)

Березовська Ірина Всеволодівна

(к. х. н., с.н.с., 02.00.01)

Дога Павло Геннадійович

(молодший науковий співробітник)

Доценко Володимир Павлович

(д.х.н., професор, 02.00.01, 02.00.01)

Зінченко Віктор Федорович

(д.х.н., професор, 02.00.01)

Кириченко Тетяна Іванівна

(д. х. н., с.н.с.)

Коровін Олександр Юрійович

(молодший науковий співробітник)

Кузьмін Віктор Євгенович

(д. х. н., професор, академік НАН України)

Кулигіна Катерина Юріївна

(к. х. н., с.н.с.)

Луцюк Анатолій Федорович

Огніченко Людмила Миколаївна

(к. х. н., с.д., старший науковий співробітник)

Смола Сергій Сергійович

(к. х. н., с.д., ст.н.с., 02.00.01)

Теслюк Ольга Іванівна

(к. х. н., доц., старший науковий співробітник, 02.00.02)

Хоменко Олена Володимирівна

(к. х. н., н.с.)

Відповідальний за підготовку

Іллюшко Наталія Олександрівна

облікових документів

Телефон

+38(067)7243955

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна