

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U101565

Державний реєстраційний номер: 0117U004136

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-02-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Синтез калікс[4]аренів, що містять три фрагменти 12-краун-4(12-азакраун-4), які приєднані по нижньому краю каліксарену за допомогою метиленового, етиленового і амідного містків, а також гомологічних рядів ДБІКЕ шляхом алкілування біс (бензімідазоїл-2-метилен)-етерів дитозилатами поліетиленгліколів. Вивчення будови та спектрально-люмінесцентних властивостей одержаних сполук та їх комплексів з іонами лантанідів. Визначення умов включення гетерометалічних лантанідних комплексів до супрамолекулярних агрегатів. Експериментальне визначення розчинності фторидів лантанідів у сольовому розплаві системи NaCl-KCl методами хімічного аналізу та спектральними методами. Виявлення залежності оптичних властивостей синтезованих сполук оксиду алюмінію, алюмінатів та силікатів елементів II-III груп зі структурою гранату від умов їх синтезу та розміру часток. Створення експертної системи щодо прогнозування показників переломлення і температур плавлення різноманітних неорганічних сполук. Позаекспериментальний

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

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 НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, 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, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1076.42
--

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:

Мета дослідження: виявлення можливості прогнозування оптичних властивостей та спрямованого синтезу нових неорганічних сполук р-, d- та f-металів, а також їх комплексів з макрогетероциклами. Методи дослідження: органічний та неорганічний синтез; тонкошарова та газорідинна хроматографія; термодинамічні та кінетичні розрахунки; коливальна, електронна, люмінесцентна, ЯМР-спектроскопія та мас-спектрометрія; рентгенофазовий та рентгеноструктурний та елементний аналіз; QSPR аналіз та молекулярний дизайн. Синтезовані похідні п-трет-бутилкалікс[4]арену з залишками моноаза-12-краун-4 та 12-краун-4-естерів, проведена оцінка їх екстракційних та комплексоутворюючих властивостей катіонів металів s-, d-елементів, досліджено їх спектрально-люмінесцентні властивості. Систематизовано дані про способи отримання дибензімідазо-краун-естерів (ДБІКЕ) на основі біс-(бензімідазоїл-2-метилєн)-естерів. Розроблено препаративні способи синтезу нових (12-, 15- та 18-члених) похідних ДБІКЕ, які відрізняються кількістю донорних центрів та варійованими розмірами порожнини. Напрацьовано низку дослідних зразків ДБІКЕ. Досліджено спектрально-люмінесцентні властивості калікс[4]аренів, модифікованих трьома фрагментами 12-краун-4(12-азакраун-4)-естерів, які приєднані по нижньому краю каліксарену. Сполуки характеризуються інтенсивною флуоресценцією та фосфоресценцією в області 360–470 нм. Експериментально підтверджено факт розчинення фторидів лантанідів у сольовому розплаві – розчині з наступною кристалізацією у вигляді наноструктур у матриці плаву. За допомогою простих моделей 1D-QSPR з використанням дескрипторів, які відображають властивості атомів, здійснили оціночний позаекспериментальний скринінг таких важливих властивостей компонентів потенційних оптичних матеріалів, як показники заломлення та температури плавлення.

Реферат англійською:

Aim of study: identification of possibility predicting optical properties and directional synthesis of new inorganic compounds of p-, d- and f-metals, also their complexes with macroheterocycles. Research methods: organic and inorganic synthesis; thin layer and gas-liquid chromatography; thermodynamic and kinetic calculations; vibrational, electronic, luminescent, NMR-spectroscopy and mass-spectrometry; X-ray phase, X-ray structural and elemental analysis; QSPR analysis and molecular design. Derivatives of p-tert-butylcalix[4]arene with remains of monoazo-12-crown-4 and 12-crown-4-esters were synthesized, their extraction and complexing properties metal cations of s-, d-elements were evaluated, their spectral-luminescent properties were investigated. Data on methods for producing dibenzimidazo-crown ethers (DBICE) based on bis-(benzimidazoyl-2-methylene)-ethers are systematized. Preparative methods have been developed for synthesis of new (12-, 15-, and 18-membered) derivatives of DBICE, which differ in number of donor centers and the variable cavity sizes. A number of DBICE prototypes have been developed. Spectral-luminescent properties of calix[4]arenes modified by three fragments of 12-crown-4 (12-azacrown-4)-ethers, which are attached along the lower edge of calixarene, were studied. Compounds are characterized by intense fluorescence and phosphorescence in region 360–470 nm. The fact of lanthanide fluorides dissolution in a salt melt – a solution with subsequent crystallization in form of nanostructures in a melt matrix is experimentally confirmed. Using simple 1D-QSPR models using descriptors that reflect properties of atoms, an evaluation was carried out on an experimental basis for screening such important

properties of components of potential optical materials as refractive indices and melting points.

Індекс УДК: 547.7/.8, 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: 31.21.27

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Кількісні моделі зв'язку «структура-властивості» (QSPR) для різноманітних неорганічних речовин – компонентів потенційних оптичних матеріалів.

Назва НТП англійською: Quantitative structure-property (QSPR) communication models for various inorganic substances, components of potential optical materials.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтезовані тризаміщені по нижньому ободу похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену, які містять залишки молекул моноаза-12-краун-4 та 12-краун-4-етерів. Проведено оцінку їх екстракційних та комплексоутворюючих властивостей щодо катіонів металів s-, d-елементів. Каліксарен, що містить фрагменти N-карбонілмоноаза-12-краун-4-етеру, є селективним комплексом катіонів натрію, кальцію (комплекси складу 1:1). Досліджено спектрально-люмінесцентні властивості калікс[4]аренів, модифікованих трьома фрагментами 12-краун-4(12-азакраун-4)-етерів, які приєднані по нижньому краю каліксарену. Сполуки характеризуються інтенсивною флуоресценцією та фосфоресценцією в області 360–470 нм. Щодо ДБІКЕ, то найбільш інтенсивний сигнал спостерігається для комплексів європію та тербію з 15-членним-лігандом, квантові виходи п 0,0049 та 0,0172, відповідно. В залежності від розміру та природи додаткового координаційного центру в (бензо)азакраун-етерах відбувається екстра-координація молекул розчинника, що призводить до збільшення безвипромінювальних втрат енергії збудження та зменшенню ефективності 4f-люмінесценції. Експериментально підтверджено факт розчинення фторидів лантанідів у сольовому розплаві. Методи РФА та хімічного аналізу показали практично ідентичні до розрахункових значення розчинності LnF₃, у той час, як для EuF₃ результати є суттєво відмінними одне від одного. Останнє пояснено частковим відновленням Eu(III) до Eu(II), а також комплексоутворенням, що сприяє зростанню розчинності.

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: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 200

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:200

Очікуваний термін окупності (років): 5

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Андронаті Сергій Андрійович

д. х. н.

Перелік осіб-виконавців

Єрьомін Олег Георгійович

(к. х. н.)

Єфрюшина Нінель Петрівна

(д. х. н., 02.00.01)

Іванов Юрій Едуардович

(к. х. н.)

Алексеева Олена Олексіївна

(к. х. н.)

Антонович Валерій Павлович

(д. х. н., 02.00.02)

Басок Степан Степанович

(к. х. н.)

Березовська Ірина Всеволодівна

(к. х. н.)

Вольчак Ганна Василівна

(к. х. н.)

Дога Павло Геннадійович

Доценко Володимир Павлович

(д. х. н.)

Зінченко Віктор Федосійович

(д. х. н.)

Камалов Герберт Леонович

(д. х. н.)

Кириченко Тетяна Іванівна

(д. х. н.)

Коровін Олександр Юрійович

Кузьмін Віктор Євгенович

(д. х. н.)

Кулигіна Катерина Юріївна

(к. х. н.)

Кікоть Леонід Станіславович

(к. х. н.)

Огніченко Людмила Миколаївна

(к. х. н.)

Починок Ельвіра Вікторівна

Русакова Наталя Володимирівна

(д. х. н.)

Семенішин Микола Миколайович

(к. х. н.)

Смола Сергій Сергійович

(к. х. н.)

Стоянова Ірина Вікторівна

(к. х. н.)

Фадеев Євген Миколайович

(к. х. н.)

Хоменко Олена Володимирівна

(к. х. н.)

Чивирева Наталія Олексіївна

(к. х. н.)

Чіхічін Дмитро Герасимович

(к. х. н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Іллюшко Н.О.

Телефон

+38 (048) 793-70-78

Реєстратор

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

