Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U003499

Державний реєстраційний номер: 0117U004136

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-02-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез калікс[4]аренів, модифікованих карбокси- та нітроген-вмісними замісниками, подандів типу біс (бензімідазоліл-2)-алканів, їх гетероаналогів та комплексів з іонами лантанідів. Вивчення будови та спектрально-люмінесцентних властивостей одержаних сполук. Встановлення впливу тривалої витримки на повітрі ("старіння") на оптичні властивості застиглих сольових плавів, що містіть сполуки Eu(II) та Eu(III). Пошук оптимальних умов синтезу активованих іонами Tb3+ та Ce3+, оксиду алюмінію, алюмінатів та силікатів елементів II-III груп зі структурою гранату. Розробка системи 1D дескрипторів на основі комбінаторних процедур обробки брутто-формул неорганічних сполук. Формування баз даних, тестування та оцінка ефективності розробленої дескрипторної системи.

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітного 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:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 048 766-20-44: факс 048 765-96-02

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: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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.): 878.59

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:

Здійснено синтез ряду заміщених похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену, що містять карбоксильні, амідні, аміно-групи в складі замісників, а також - залишки молекул аза-, амідобензо- та бензоаза-краун-ефірів, приєднаних до каліксаренового каркасу за допомогою О-метілен- або етіленкарбамоільних фрагментів. Отримано дані їх люмінесценції, здатність формувати комплекси з іоном тербія. Вивчено комплексоутворюючі властивості похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену з катіонами лужних, лужноземельних та перехідних металів. Досліджено вплив карбокси- та нітрогенвмісних замісників на координуючі та спектральні властивості функціональних похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену і комплексів лантанідів на їх основі. Методами люмінесцентної спектроскопії, електронної спектроскопії дифузного відбиття та ІЧ спектроскопії пропускання досліджено процес зміни наноструктур синтезованого фториду європію (II) в застиглому сольовому плаву NaCl - KCl. Встановлено, що отриманий методом газодисперсного синтезу нанорозмірний оксид алюмінію, активоване іонами Cr3+, з розміром частинок 10-70 нм складається з суміші метастабільних модифікацій (?*,?) Al2O3, а відмінності люмінесцентних властивостей іонів Cr3+ в модифікаціях Al2O3 дозволяють розглядати нанорозмірний Al2O3:Cr3+ в якості перспективного термолюмінесцентного сенсора для температур в діапазоні 1100-1300 оС. Проведено аналіз можливості побудови адекватних QSPR моделей для прогнозу властивостей на основі інформації про фундаментальні характеристики атомів, а також зібрана інформація для формування бази даних щодо температур плавлення та показників заломлення неорганічних сполук різноманітних класів.

Реферат англійською:

Synthesis of number substituted p-tert-butylalkyl[4]arene derivatives, containing carboxyl, amide, amino groups in substituents, also remaindres of aza-, amidobenzo- and benzoaza-crown ethers, attached to calixarene framework by O -methylene or ethylene carbamoyl fragments were done. Data of their luminescence, ability to form complexes with terbium ion are obtained. Complex formation properties of p-tert-butylalkyl[4]arene derivatives with alkali, alkaline earth and transition metals cations have been studied. Effect of carboxy- and azo-containing substituents on coordinating and spectral properties of p-tret-butylalkyls[4]arene functional derivatives and lanthanide complexes on their basis, was studied. Process of changing nanostructures synthesized europium fluoride (II) in solidified NaCl - KCl molten salt has been studied by luminescent spectroscopy, diffuse reflection electron spectroscopy and IR spectroscopy methods. It was established, that obtained by gas-dispersed synthesis nanoscale aluminium oxide, activated by Cr3+ ions, with particle size 10-70 nm consist mixture of metastable Al2O3 modifications (?*,?) and differences in luminescence properties of Cr3+ ions in Al2O3 modifications allow to consider nanoscale Al2O3:Cr3+ as perspective thermoluminescent sensor for temperatures range 1100-1300 °C. Possibility of constructing adequate QSPR models for prediction properties based on information about atoms fundamental characteristics was analyzed, and also information was collected to develop database relatively melting points and refractive indexes of inorganic compounds of various classes.

Індекс УДК: 548, 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: 31.15.17

Керівники роботи

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

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Синтез похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену, що містять карбоксильні, амідні, аміно-групи в складі замісників, а також - залишки молекул аза-, амідобензо- та бензоаза-краун-ефірів, приєднаних до каліксаренового каркасу за допомогою О-метілен- або етіленкарбамоільних фрагментів. Препаративні способи синтезу подандів класу біс-(бензимідазоліл-2)-алканів та їх аналогів з алкільніми, ефірними, тіоефірними, аміноалкільними та поліефірними містковими зв'язками. Метод отримання активованого іонами Cr3+ нанорозмірного оксиду алюмінію з розміром частинок 10-70 нм.

Назва НТП англійською: Synthesis of p-tert-butylalkyl[4]arene derivatives, containing carboxylic, amide, amino groups in substituents, also remainders of aza-, amidobenzo-and benzoaza-crown ethers molecules attached to calixarene framework by O-methylene- or ethylene carbamoyl fragments. Preparative methods for synthesis of bis-(benzimidazolyl-2)-alkanes and their analogues with alkyl, ether, thioether, aminoalkyl and polyether bridges bonds. Method for production of nanoscale aluminium oxide with particle size 10-70 nm

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Осуществлен синтез ряда в различной степени замещенных по нижнему ободу производных п-трет-бутилкаликс[4]арена, содержащих карбоксильные, амидные, амино-группы в составе заместителей, а также - остатки молекул аза-, амидобензо- и бензоаза-краун-эфиров, присоединенных к каликсареновому каркасу посредством О-метилен- или этиленкарбамоильных фрагментов. Получены данные, позволяющие оценить значения молекулярной люминесценции некоторых из синтезированных соединений, содержащих карбоксильные и амидные фрагменты, и изучена их способность формировать комплексы с ионом тербия. Методом спектрофотометрического титрования показано, что моно- и дизамещенные макроциклы с остатками амида уксусной кислоты в качестве заместителя, способны связывать в комплексы ионы тербия с усилением люминесценции последнего. Установлена способность подандов типа бис-(бензимидазолил-2)-алканов к сенсибилизации 4f-люминесценции в видимой и ближней ИК-области спектра на примере комплексов Tb(III) и Yb(III), соответственно. Наиболее интенс

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Хімічна галузь

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Єрьомін О.Г.

Іванов Юрій Едуардович
(к. х. н.)

Алєксєєва О.О.

Антонович В.П.

Березовська Ірина Всеволодівна
(к. х. н.)

Дога Павло Геннадійович

Доценко В.П.

Зінченко В.Ф

Камалов Г.Л.

Кириченко Т.И.

Коровін А.Ю

Кошкіна Л.Ф.

Кузьмін В.Є.

Кулигіна К.Ю.

Нечипоренко А.В.

Огніченко Л.М.

Русакова Н.В.

Снурнікова О.В.

Стоянова И.В.

Хоменко О.В.

Чивирева Н.А.

Чіхічін Дмитро Герасимович
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

