Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U004411

Державний реєстраційний номер: 0113U001530

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-04-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Ізополі- та гетерополіаніони у водно-органічних та фізіологічних розчинах

Початок етапу: 01.2014

Закінчення етапу: 12.2014

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(063) 477-76-20

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки

Код за ЄДРПОУ: 37536162

Місцезнаходження: пр-т Перемоги, 10, м. Київ, Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 406-82-00, 406-83-80

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.): 184.1

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Поліоксометалати елементів V і VI груп у розчинах, твердій фазі та медичних композиціях із гідроксиапатитом

Назва роботи англійською:

Polyoxometalates of elements of V and VI groups in solutions, solid phase and medical compositions with hydroxyapatite

Реферат українською:

Встановлені області існування ізополівольфрамат-аніонів у розчинах Na2WO4 - HCl - NaCl - DMF - H2O в залежності від вмісту розчинника. Із водно-диметилфомамидного розчину синтезовано новий кристалічний декавольфрамат [Ba(H2O)2(C3H7NO)3]2[W10O32]?(C3H7NO)2, який був досліджений методами хімічного, мікроскопічного аналізів, ІЧ-спектроскопією, диференційно-термічним, рентгенофазовим, рентгеноструктурним методами аналізу. Із розчинів системи Ni2+ - WO42- - H+ - H2O синтезовано гетерополигексавольфрамоніколат(II) натрію зі структурою Андерсона Na4[Ni(OH)6W6O18]?16H2O та методами термічного, рентгенофазового та мікроскопічного аналізу проведена характеризація його властивостей. Встановлені умови утворення із паравольфрамату Б натрію Na10[W12O40(OH)2]?27H2O синтезовано средні солі церію, диспрозію та гольмія з аніоном паравольфрамату Б ? Ce10[W12O40(OH)2]3?94H2O, Dy10[W12O40(OH)2]3·100H2O, Ho10[W12O40(OH)2]3·54H2O.

Реферат англійською:

The formation and transformation processes of isopolytungstates in the system Na2WO4 - HCl - NaCl - DMF - H2O with different dimethylformamide (DMF) concentration have been studied by means of single-point pH-potentiometric titration and the subsequent modeling of the equilibria processes. The modeling of equilibria processes resulted in data necessary to synthesize a novel barium decatungstate, [Ba(H2O)2(C3H7NO)3]2[W10O32]?(C3H7NO)2. Synthesized salt was characterized by elemental and EDX spectral analysis, SEM, FTIR spectroscopy, thermal analysis, single-crystal X-ray diffraction analysis in solid state, and by UV-Vis. spectroscopy in solution. Conditions necessary for the formation of potassium-nickel paratungstate B K6Ni2[W12O40(OH)2]?22H2O (1) and potassium-nickel heteropoly hexatungstonickelate (II) with Anderson type anion K3Ni0,5[Ni(OH)6W6O18]?12H2O (2) in Ni(NO3)2 ? K2WO4 ? HNO3 ? H2O solution, acidified up to Z = ?(H+)/?(WO42-) = 1,00, were established. The synthesized salts 1 and 2 were examined using chemical analysis, X-ray single crystal analysis and FTIR spectroscopy. The compound 1 crystallizes in the triclinic system, space group , Mr = 3628.59, a = 10.617(3) ?, b = 11.818(2) ?, c = 13.454(3) ?, ? = 68.034(18)°, = 76.96(2)°, = 63.53(2)°, V = 1398.0(5); the compound 2 crystallizes in the monoclinic system, space group P21/n, Mr = 1914.71, a = 11.2586(3) ?, b = 11.4933(6) ?, c = 26.1158(15) ?, ? = 100.938(4)°, V = 3318.0(3) ?3. In the structure 1 paratungstate B anion [W12O40(OH)2]10- is centrosymmetric and occupies the center [[1/2,0,1/2]], while 2D layers consist of isopolyanion and potassium polyhedra KOn (n = 8, 10), forming the 3D structure through NiO6 octahedra. The structure 2 comprises Anderson type anions [Ni(OH)6W6O18]4-, cationic polyhedra NiO6, KO8 and uncoordinated H2O molecules. The surface morphology of sodium heteropoly hexatungstonickelate (II) Na4[Ni(OH)6W6O18]?16H2O was investigated by scanning electron microscopy and the single-phase nature of the obtained sample was proven. Thermal transformations of Na4[Ni(OH)6W6O18]?16H2O was investigated by thermal analysis, XRD, and FTIR spectroscopy. It was found that destroying of the heteropoly anion with Anderson structure takes place after calcination of heteropoly salt above 250°C. The thermolysis products of Na4[Ni(OH)6W6O18]?16H2O are NiWO4, Na2W4O13, Na2W2O7. The conditions for the synthesis of novel Ce(III), Dy(III), and Ho(III)-containing salts with paratungstate B anion were determined. By the methods of chemical analysis and FTIR spectroscopy it was shown that Ce10[W12O40(OH)2]3?94H2O, Dy10[W12O40(OH)2]3·100H2O, Ho10[W12O40(OH)2]3·54H2O were precipitated

from Na10[W12O40(OH)2]?27H2O solution after adding the stoichiometric amounts of lanthanide (III) salts. By FTIR spectroscopy, the isopoly anion is shown to belong to the paratungstate B structural type. It was found that single-phase product can not be obtained from acidified up to Z = ?(H+)/?(WO42-) = 1.17 aqueous solutions of Na2WO4. By the method of scanning electron microscopy it was shown that the grain size of synthesized salts is within the range of 300-750 nm. Homogeneity of the obtained paratungstate B salts was confirmed by the uniform contrast of the surface mode of backscattered electrons.

Індекс УДК: 546, 546(75+88+65):544.341.2:661.635.41

Коди тематичних рубрик: 31.17.15

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: Навчальний посібник "Будова атома та періодичність"

Назва НТП англійською: The tutorial "The atomic structure and the periodicity"

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: навчальний посібник

Галузь застосування: 21.20 Виробництво фармацевтичних препаратів і матеріалів. 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук. 85.42 Вища освіта.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У навчальному посібнику викладено теоретичний матеріал для вивчення загального курсу «Будова атома та періодичний закон». Наведено приклади розв'язання розрахункових задач різних типів із застосуванням знань періодичного закону та основ квантової механіки, теоретичних питань для самопідготовки студентів до складання модульного контролю, а також варіанти індивідуальних завдань для самостійного розв'язування.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: впроваджено у навчальний процес

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: студенти хімічного факаультету ДонНУ

Перспективні ринки: ринок освітніх послуг України та СНД

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 20

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 50

Очікуваний термін окупності (років): 5

Додаткова інформація: ліцензійний договір

IX. Бібліографічний опис

1. Зайцева Н.Н., Пойманова Е.Ю. Дослідження водно-диметилформамідних розчинів з ізополівольфрамат-аніонами методом УФ-спектроскопії / Вісник студентського наукового товариства Донецького національного університету. Вип. 6. Т. 1. Донецьк 2014. 2. Пойманова О.Ю., Розанцев Г.М., Білоусова К.Є., Зайцева Н.Н. Залежність стану системи Na2WO4-HCl-NaCl-DMSO(40об.%)-H2O від часу витримування /

Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. -2014. -№ 1. С. 166-169. 3. O. Yu. Poimanova, S. V. Radio, K. Ye. Bilousova, V. N. Baumer and G. M. Rozantsev. Equilibria in the acidified aqueous-dimethylformamide solutions of tungstate-anion. Synthesis, crystal structure and characterization of novel decatungstate [Ba(H2O)2(C3H7NO)3]2[W10O32]*(C3H7NO)2 / Journal of Coordination Chemistry. 2015. Vol. 68, № 1, P. 1-17. (Impact factor 2,212) 4. Пойманова Е.Ю., Розанцев Г.М., Белоусова Е.Е., Чунтук Е.С. Состояние изополивольфрамат-анионов в водно-ацетонитрильной среде / Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. -2014. -№ 2. С. 126 130. 5. Радио С.В. Синтез солей лантаноидов с анионом паравольфрамата Б, Ln10[W12O40(OH)2]3*nH2O (Ln = Ce, Dy, Ho) // Наукові праці ДонНТУ. Серія: Хімія і хімічна технологія. - 2014. - № 1 (22). - С. 81-88. 6. S. V. Radio, N. A. Melnik, E. S. Ivantsova, V. N. Baumer. Crystal structure of double sodium-copper(II) paratungstate B: Na2Cu3(CuOH)2[W12O40(OH)2]·32H2O / Journal of Structural Chemistry 2014. Vol. 55, 5. P. 879 886. (Impact factor 0,63) 7. Морфология поверхности и термические превращения Na4[Ni(OH)6W6O18]*16H2O / Н.И. Гумерова, А.О. Пилипенко, Г.М. Розанцев, С.В. Радио // Украинский химический журнал. -2014. -Т. 80, № 3-4. -С. 85-90. 8. Synthesis and crystal structure of potassium-nickel heteropoly hexatungstonickelate (II) K3Ni0,5[Ni(OH)6W6O18]*12H2O with Anderson-type anion and potassium-nickel paratungstate B K6Ni2[W12O40(OH)2]*22H2O / N.I. Gumerova, K.V. Kasyanova, G.M. Rozantsev, V.N. Baumer, S.V. Radio // Journal of Cluster Science. -2014. - Режим доступу до журн.: http://link.springer.com/article/10.1007/s10876-014-0805-2 (опубліковано on-line 18 жовтня 2014 р.). (Impact factor 1,356)

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Гринюк Роман Федорович

Перелік осіб-виконавців

Білоусова Катерина Євгенівна

Гумерова Надія Ісмагілівна

Заславська Людмила Володимирівна

Кузьміних Оксана Олександрівна

Мельник Наталя Олександрівна

Пилипенко Анастасія Олегівна

Пойманова Олена Юріївна

Радіо Сергій Вікторович

Хаустов Данило Володимирович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

